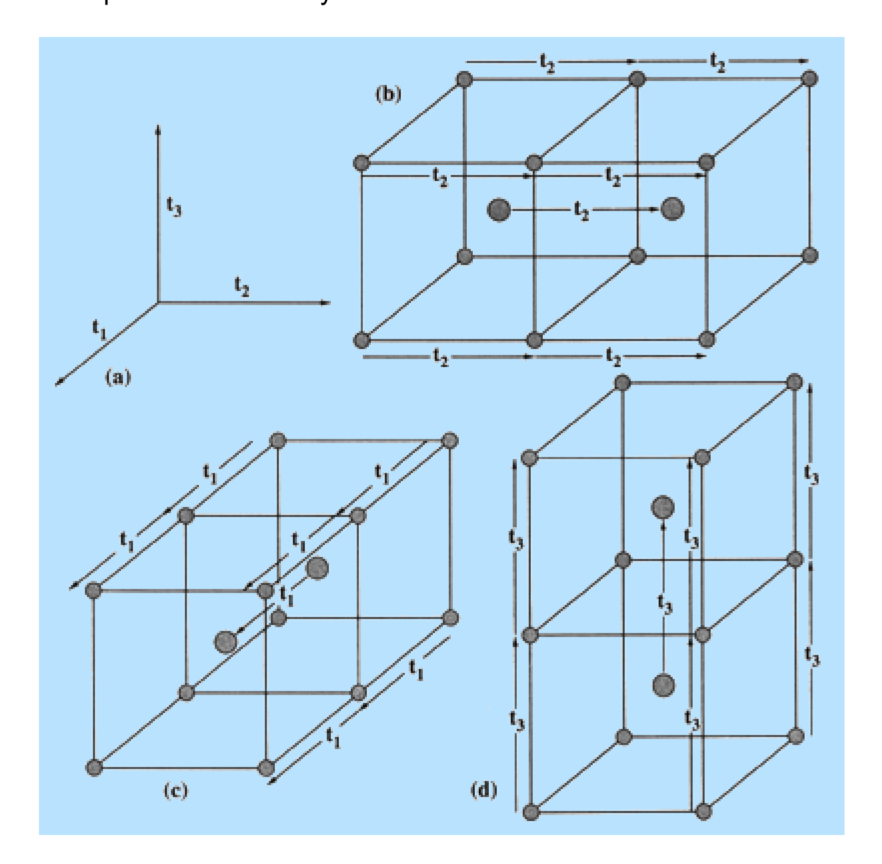
CURSO DE CRISTALOGRAFÍA ESTRUCTURAL

EL ESTADO CRISTALINO

1.1- INTRODUCCIÓN

Se describen como materiales cristalinos aquellos materiales sólidos cuyos elementos constitutivos se repiten de manera ordenada y paralela y cuya distribución en el espacio muestra ciertas relaciones de simetría. Así, la propiedad característica y definidora del medio cristalino es ser periódico, es decir, que a lo largo de cualquier dirección, y dependiendo de la dirección elegida, la materia que lo forma se halla a distancias específicas y paralelamente orientada. Además de ésta, otras propiedades características son la homogeneidad y la anisotropía.

Por tanto, el cristal está formado por la repetición monótona de agrupaciones atómicas paralelas entre sí y a distancias repetitivas específicas (**traslación**). La **red cristalina** es una abstracción del contenido material de este medio cristalino, y el tratarlo únicamente en función de las traslaciones presentes constituye la esencia de la teoría de las redes cristalinas.



En la red cristalina todos los puntos, nudos, tienen exactamente los mismos alrededores y son idénticos en posición con relación al patrón o motivo que se repite. Este motivo es una constante del cristal ya que constituye el contenido material, es decir, su naturaleza atómica, de manera que red x motivo = cristal.

En esta red espacial existe una porción del espacio cristalino, denominado celda unidad, el cual repetido por traslación y adosado desde un punto reticular a otro engendra todo el retículo. De esta manera, conociendo la disposición exacta de los átomos dentro de la celdilla unidad, conocemos la disposición atómica de todo el cristal.

- Periodicidad

El medio cristalino es un medio periódico ya que a lo largo de cualquier dirección la materia que lo forma se halla a distancias específicas y paralelamente orientada, de forma que la orientación y distancias a que se encuentran dependen de la dirección elegida. La distancia según la cual las unidades estructurales se repiten paralela e idénticamente a lo largo de una dirección dada se denomina traslación. Éstas definen la denominada **red cristalina**, constituida por una serie de puntos (**nudos**) separados entre sí por las citadas traslaciones.

- Homogeneidad

En una red cristalina la distribución de nudos alrededor de uno de ellos es la misma, independientemente del nudo que tomemos como referencia. Así una red es un conjunto de nudos homogéneos o bien, un conjunto homogéneo de nudos.

- Anisotropía

La red de nudos constituyente del estado cristalino es anisótropa en cuanto a las distancias entre nudos, es decir, ésta depende de la dirección según la cual se mide.

1.2- REDES CRISTALINAS

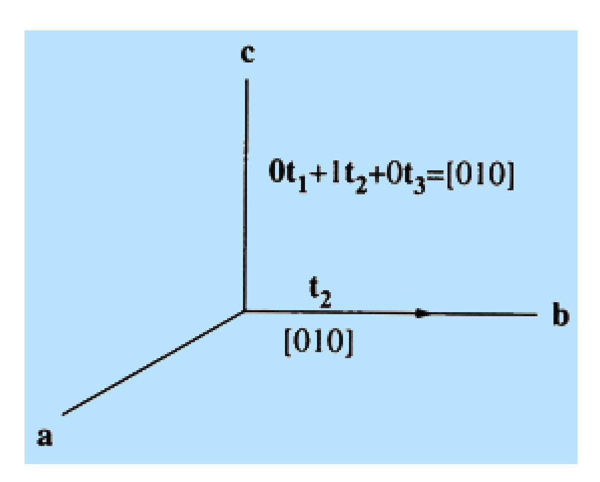
Para una apropiada asimilación de lo que significa el orden interno cristalino, se ha de comenzar por la visualización y definición, a través de vectores traslación, del orden interno monodimensional , constituido por las diferentes direcciones de la red que definen, por su periodicidad, filas reticulares donde los nudos están alineados y equidistantes entre sí.

- Fila reticular

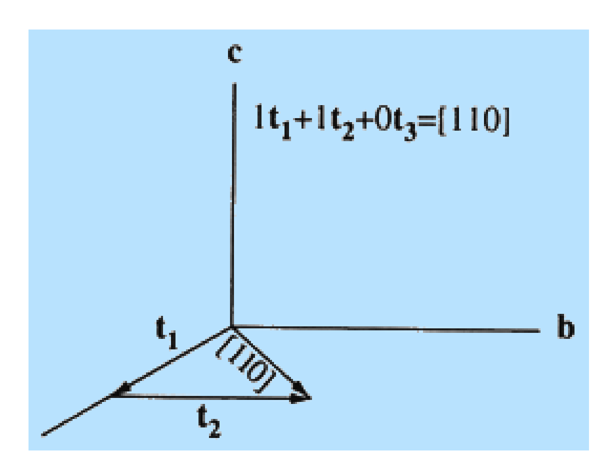
Se trata de una fila de nudos obtenida por aplicación sucesiva de una traslación definida.

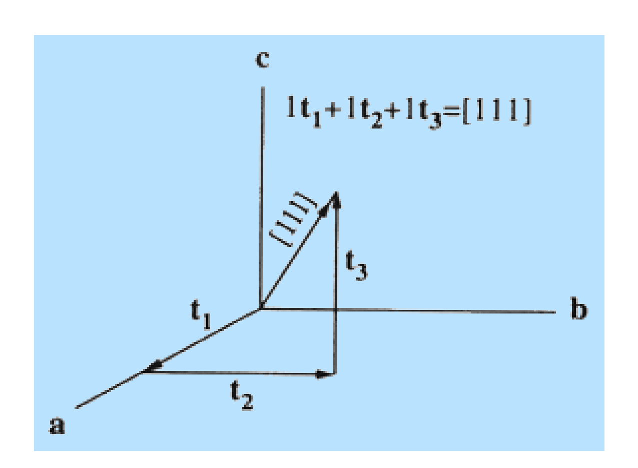
El símbolo de las filas reticulares se denomina como los índices [uvw] que son los componentes del vector traslación que une dos nudos adyacentes de la fila considerada expresados en función de un par primitivo cuyo origen se sitúa sobre uno de estos dos nudos.

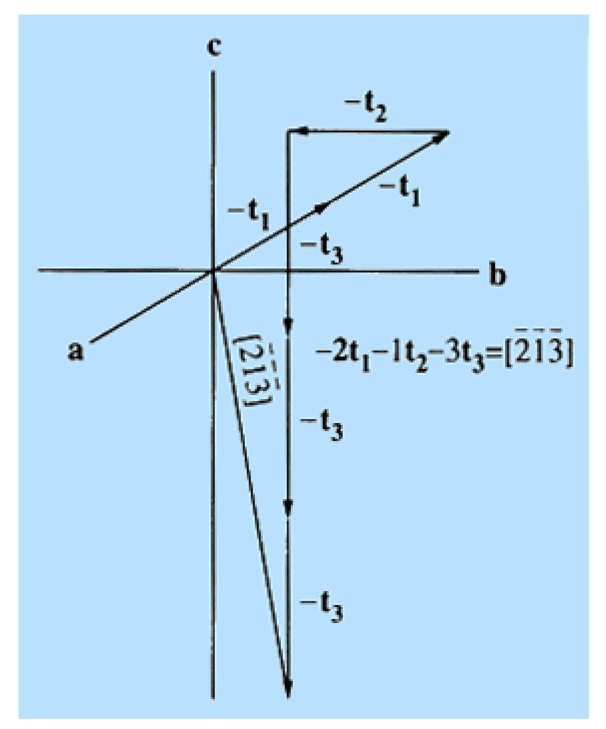
Por ejemplo, para las filas fundamentales:

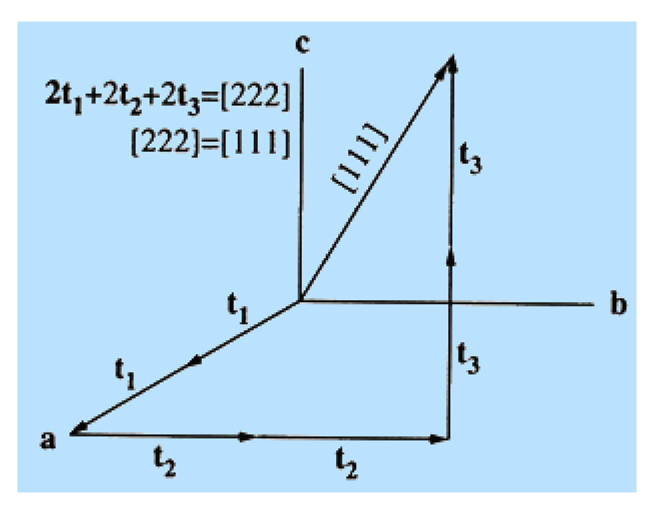


Para otras filas reticulares:







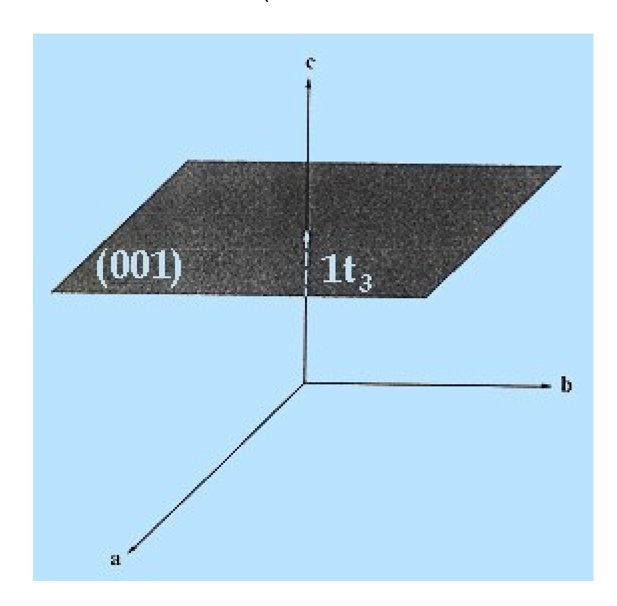


- Plano reticular

Un plano reticular queda definido por dos filas reticulares conjugadas. Todo plano reticular puede definirse por sus intersecciones (Ha, Kb, Lc) con los tres ejes fundamentales del cristal. Las dimensiones de estas intersecciones (HKL), medidas desde un nudo tomado como origen son los parámetros del plano reticular correspondiente. Sin embargo, la denominación habitual de un plano reticular son los índices de Miller.

- Índices de Miller

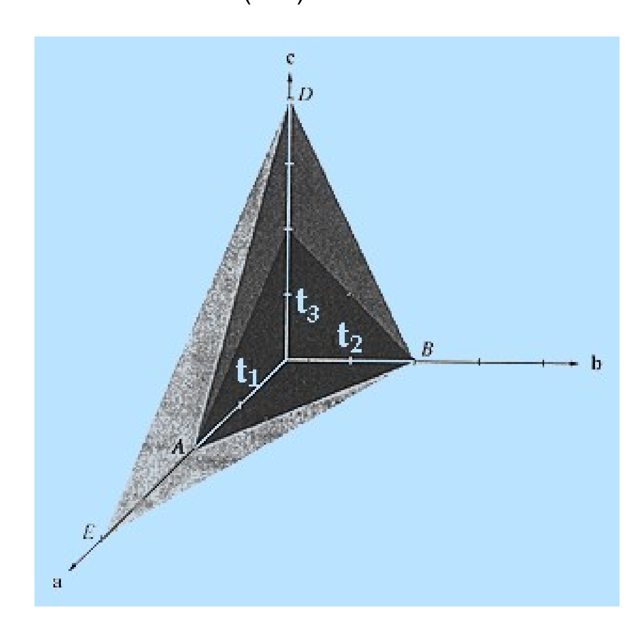
Se obtienen calculando las intersecciones (H, K, L), o número de traslaciones, con los tres ejes fundamentales del cristal. Posteriormente se invierten y se eliminan denominadores, o bien, se calculan los cocientes entre el producto de las tres intersecciones dividido entre cada una de las intersecciones: (H*K*L= N, N/H= **h**, N/K=**k**, N/L=**l**)



Intersecciones: H=æ, K=æ, L=1,

Invertimos: 1/æ=0, 1/æ=0, 1/1=1, no existen denominadores

Índices de Miller: (001)



1º. Deducir las intersecciones de cada plano con los ejes cristalográficos a, b y c. Es decir, contar el número de traslaciones t1, t2 y t3 que ocupa el plano sobre los ejes a, b y c.

El plano **ABD** ocupa:

2t1 en el eje **a**,   **2t2** en el eje **b**, y   **4t3** en el eje **c**

El plano **EBD** ocupa:

4t1 en el eje **a**,   **2t2** en el eje **b**, y   **4t3** en el eje **c**

2º. Para calcular los índices de Miller de cada plano, a partir de estas intersecciones, se invierten los valores y, si es necesario, se reducen las fracciones

El plano **ABD** corta a los ejes en 2, 2 y 4.

Su inversión es: 1/2, 1/2, 1/4.

Reducimos fracciones, quitando denominadores: 2/4, 2/4, 1/4. Sin denominadores queda 221

Índices de Miller: (221)

El plano **EBD** corta a los ejes en 4, 2 y 4.

Su inversión es: 1/4, 1/2, 1/4.

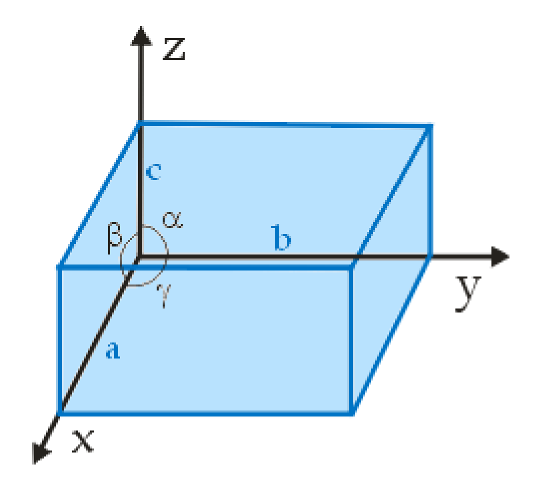
Reducimos fracciones, quitando denominadores: 1/4, 2/4, 1/4. sin denominadores queda 121

Índices de Miller: (121)

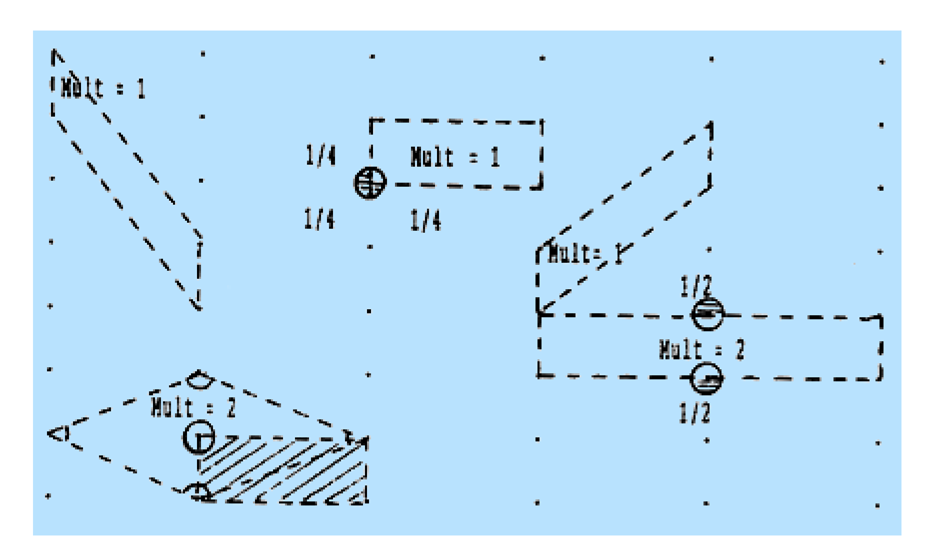
* Este símbolo entre paréntesis **(hkl)** nombra el plano dado, mientras que entre corchetes **{hkl}** indica todos los planos homólogos que resultan de aplicar los elementos de simetría del cristal al plano **(hkl)**.

- Celda unidad

En una red cristalina existen siempre tres traslaciones no coplanarias que tienen las dimensiones mínimas entre todas las traslaciones posibles de la red: son las traslaciones fundamentales o constantes reticulares, de dimensiones submicroscópicas. La porción del espacio cristalino limitado por estas traslaciones constituye la celda fundamental del cristal y es característica del mismo.



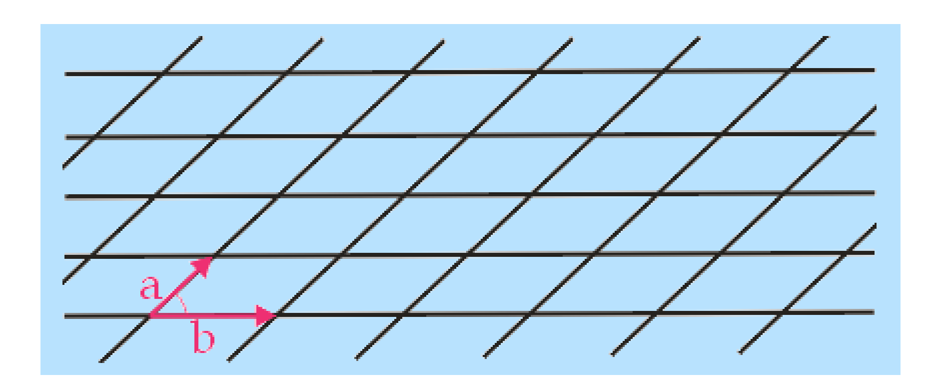
Se denomina celda primitiva aquella que no tiene nudos en su interior y celda múltiple a la que si los tiene y está definida por vectores múltiples que son múltiplos enteros del vector traslación unitario de igual dirección. Se llama multiplicidad al número de nudos que hay por celda elemental (todas las celdas primitivas de una red tienen multiplicidad 1 , ¼ * 4 = 1)



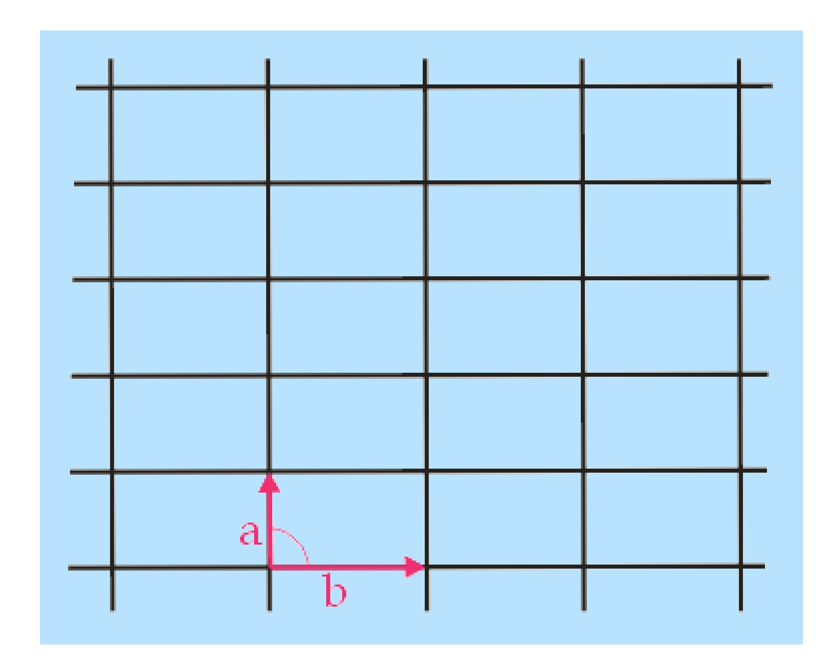
- Redes planas

El orden bidimensional es el resultado de traslaciones regulares en dos direcciones distintas que resultan en la definición de los cinco tipos de **redes planas**. La asimilación de este orden bidimensional es básica para comprender la regularidad correspondiente a objetos tridimensionales tales como la materia cristalina. Se definen cinco tipos de redes planas con las siguientes características:

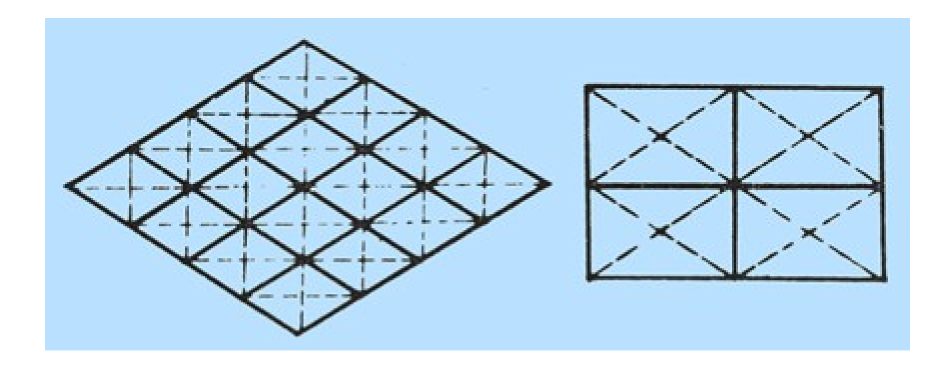
Red oblicua ($a \neq b$ $\gamma \neq 90º$)



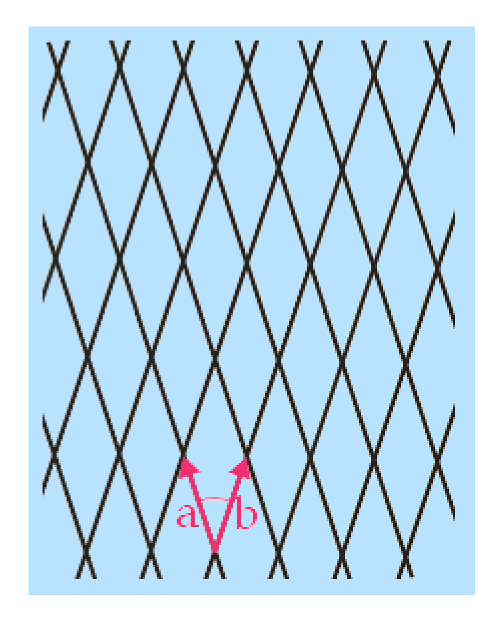
Red rectangular ($a \neq b$ $\gamma = 90º$)



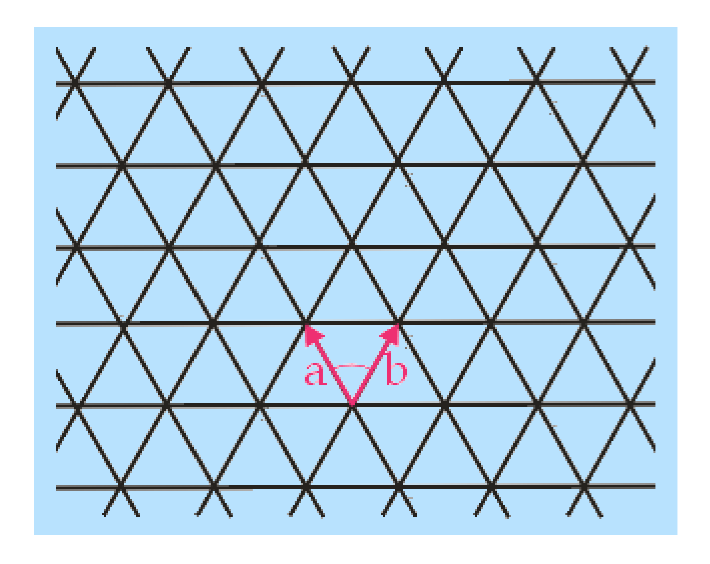
Existen también **redes centradas**, que son el resultado de añadir nuevos nudos en el centro de cada paralelogramo generador de la red plana. Sólo puede realizarse esta operación de centrado si la red resultante es morfológicamente diferente de la original; por ello sólo pueden centrarse las redes rectangulares (obteniéndose una red rómbica) o las redes rómbicas (dando lugar a una red rectangular).



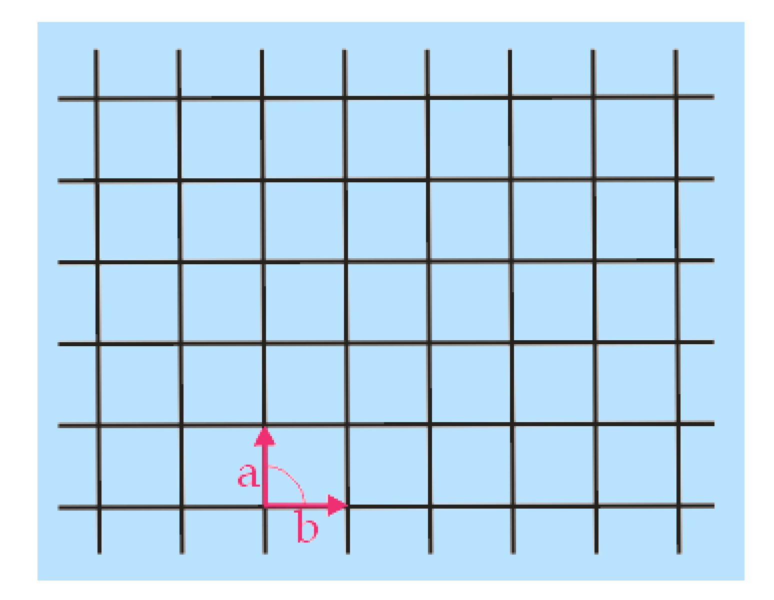
Red rómbica (a=b $\gamma \neq$ 90º, 60º, 120º)



Red hexagonal (a=b γ =60º, 120º)



Red cuadrada (a=b γ =90º)



Las redes planas forman, por apilamiento homogéneo, los distintos tipos de redes espaciales, es decir, las distintas familias de planos cristalinos que integran el cristal. La manera como estos planos se apilan determina los ángulos entre las traslaciones fundamentales en las tres dimensiones que es lo que define, a su vez, la forma y dimensiones del paralelepípedo o celda unidad que caracteriza la red cristalina.

- Redes de Bravais

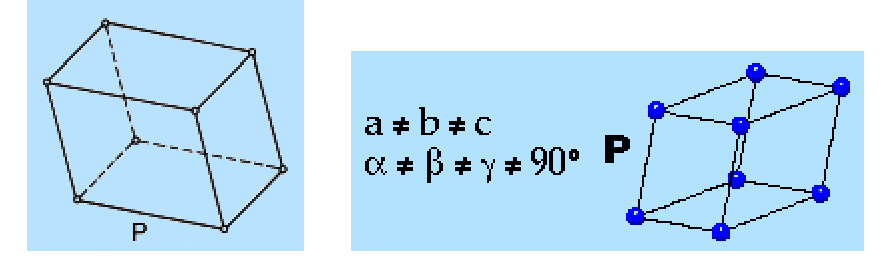
De la superposición de planos se generan catorce celdas morfológicamente distintas que se conocen como las Redes de Bravais, en honor de su descubridor.

En términos de redes cristalinas tridimensionales, los paralelepípedos fundamentales, morfológicamente distintos son el resultado de combinar las tres traslaciones fundamentales de valores dados con sus inclinaciones respectivas, es decir, con los tres ángulos α , ß, y γ .

Su construcción se realiza apilando paralelamente una sucesión infinita de modelos planos idénticos, de manera que la distancia entre ellos sea siempre igual (familia de planos). Mientras que en el plano se deducían cinco tipos de redes, en el espacio tridimensional se reconocen hasta catorce distribuciones periódicas:

Red triclínica (a#b#c α #ß#γ #90º)

Debido a los valores distintos entre sí de las traslaciones y de los ángulos fundamentales, el paralelepípedo tiene forma cualquiera, triplemente inclinado (por ello se denomina triclínico). Se trata de una red primitiva.

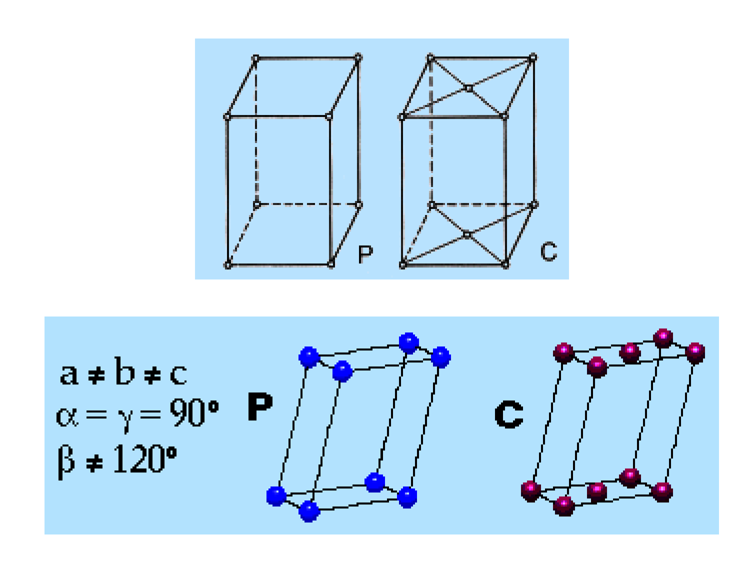


Redes monoclínicas (a#b#c α =γ =90º#ß)

La celda es un paralelepípedo no recto de base rectangular (formados por redes planas rectangulares).

- Red monoclínica primitiva, P

- Red monoclínica de base centrada



La operación de centrado de redes permite la generación de este otro tipo de red. Si se centra la red plana rectangular (100), su símbolo es A, y si se centra la (001) es C. Morfológicamente estas redes sólo se diferencian en su orientación, por tanto, las redes monoclínicas de base centrada A y C son equivalentes.

Redes rómbicas (a#b#c α =ß=γ =90º)

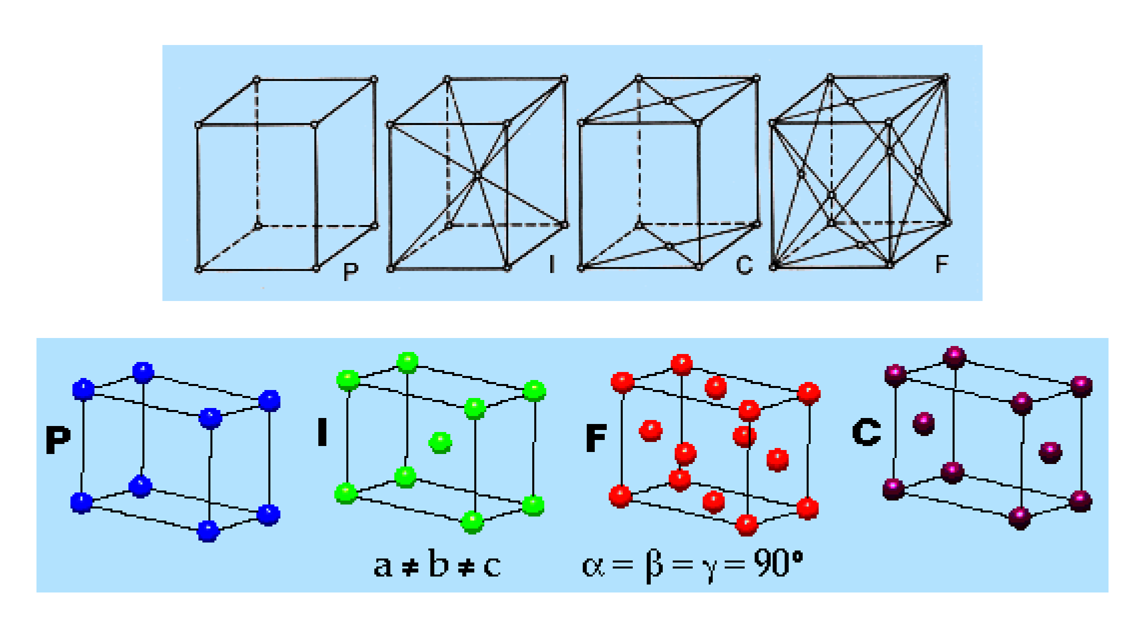
- Red rómbica primitiva, P

El paralelepípedo fundamental es un prisma recto de base rectangular. Los tres planos fundamentales, (100), (010) y (001), más los planos diagonales del prisma, son redes planas rectangulares.

- Redes rómbicas centradas

La operación de centrado de redes permite la generación de estos otros tipos de red. Si se centran las redes planas rectangulares (100), (010) y (001) sus símbolos son respectivamente A, B y C.

Morfológicamente estas redes son iguales y se denominan red rómbica de base centrada, simbolizada por C. Cuando la operación de centrado es sobre las tres caras a la vez, la red se denomina red rómbica de caras centradas y se simboliza por F. Si el centrado se produce en los planos diagonales del prisma, la red resultante se denomina red rómbica centrada en el interior, de símbolo I.



Redes tetragonales (a=b#c α =ß=γ =90º)

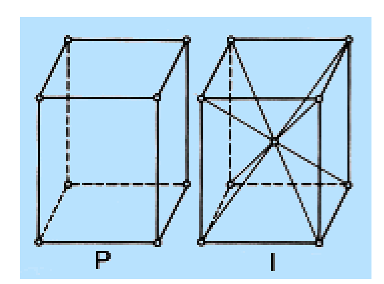
- Red tetragonal , P

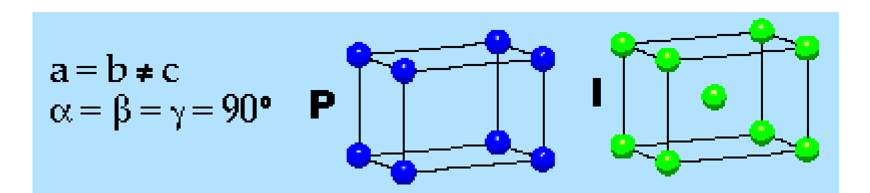
La celda fundamental es un prisma recto de base cuadrada. La familia de planos (001) son de red plana cuadrada, mientras que (100) y (010) son rectangulares e idénticos entre sí.

- Red tetragonal centrada, I

Al ser iguales por simetría, los planos (100) y (010) no pueden centrarse independientemente, y, a su vez, no pueden hacerlo simultáneamente porque ello destruye la homogeneidad de los planos de la misma familia.

Sin embargo, los planos diagonales, que son también redes rectangulares, pueden centrarse dando origen a la **red tetragonal centrada en el interior, I.**

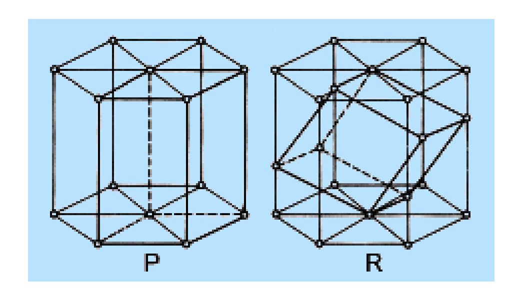




Red hexagonal, P (a=b#c α =ß=90º, γ =120º, 60º)

El paralelepípedo fundamental es un prisma recto de base rómbica (de ángulo de 60º). Para visualizar la forma hexagonal se toma una celda múltiple integrada por tres de estas celdillas rómbicas

Esta red hexagonal permite un apilamiento especial de los planos hexagonales. Según éste, los nudos se proyectan a 1/3 o a 2/3 de la diagonal mayor del rombo, dando como resultado una **red romboédrica, R** de (a=b=c α =ß=γ #90º)



$a = b \neq c$
$\alpha = \beta = 90°$
$\gamma = 120°$
P

$a = b = c$
$\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$
P

Redes cúbicas (a=b=c α =ß=γ =90º)

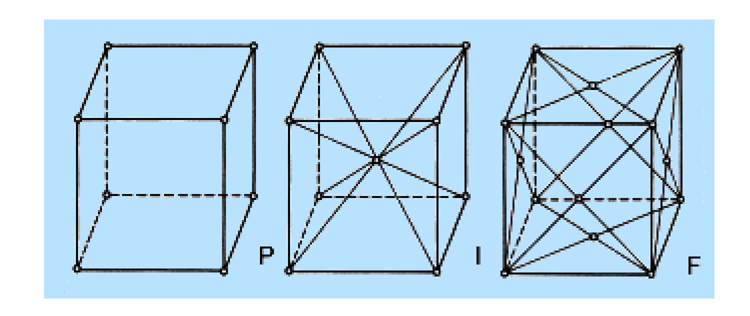
- Red cúbica primitiva, P:

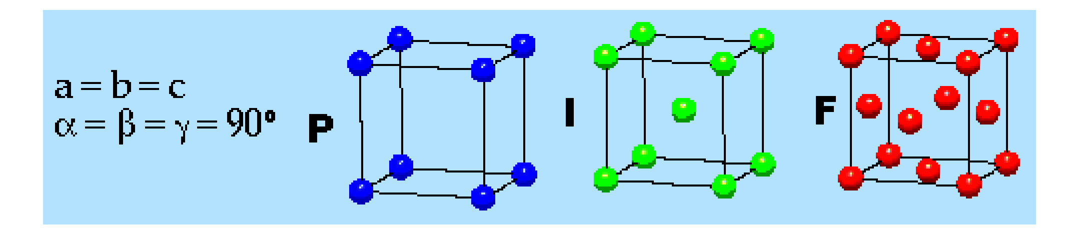
El paralelepípedo fundamental es un cubo.

- Redes cúbicas centradas:

El centrado de las caras del cubo no debiera ser posible puesto que son redes planas cuadradas. Las redes cúbicas centradas se originan cuando el ángulo del romboedro se hace igual a 60º y las tres diagonales del romboedro se hacen iguales entre sí, definiendo las aristas de un cubo que circunscribe al romboedro. Así, la distribución de nudos es la correspondiente a un cubo de caras centradas, originando la red cúbica de caras centradas, F.

De forma similar, cuando el ángulo entre las aristas del romboedro es de 109º 28´ 16´´, las diagonales de sus tres caras fundamentales son perpendicuales entre si e iguales en magnitud, y definen un cubo inscrito en el romboedro. La distribución de nudos corresponde a una red cúbica centrada en el interior, I.





(Las redes cúbicas no sólo son casos especiales de redes romboédricas, sino que también lo son de redes tetragonales).

1.3- SIMETRÍA

La porción mínima del espacio cristalino que contiene en sí misma toda la simetría de la red cristalina es la celda unidad. El medio cristalino, por ser periódico, es un medio simétrico, y todas sus propiedades derivan de este hecho.

Entendiendo por simetría aquella transformación que al aplicarse a un objeto hace que éste conserve todas sus dimensiones, y lo deje en una posición indistinguible de su posición original, la operación de simetría más sencilla que existe, por definición, en el medio cristalino, es la simple traslación entre un motivo y otro.

- Elementos de simetría

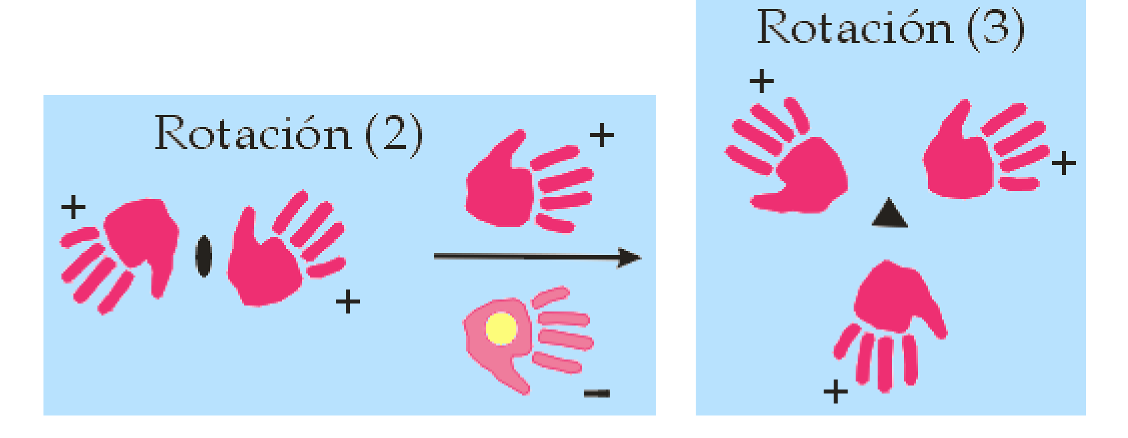
El lugar geométrico que ayuda a la visualización de la simetría de una distribución ordenada recibe el nombre de elemento de simetría. Los elementos de simetría puntual (la operación de simetría deja un punto particular del diagrama inmóvil), sin traslación, son el plano de simetría, el eje de rotación y el centro de simetría o centro de inversión.

El plano de simetría, m, o de reflexión, refleja partes, o todos, idénticos del objeto a través de un plano.



El eje de rotación origina una rotación al objeto de 360º/n alrededor del eje (de derecha a izquierda).

eje monario		**n=1** (360º/1=360º)
eje binario	⬮ *(perpendicular al plano)* → *(paralelo al plano)*	**n=2** (360º/2=180º)
eje ternario	▲	**n=3** (360º/3=120º)
eje cuaternario	■	**n=4** (360º/4=90º)
eje senario	⬢	**n=6** (360º/6=60º)



*(La **restricción cristalográfica** limita los giros permisibles a estos cinco para que su orden sea compatible con la existencia de redes.)*

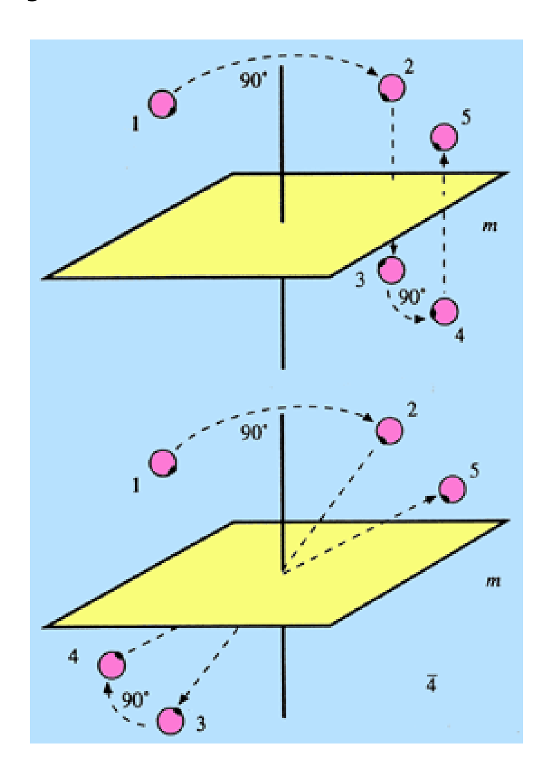
Las combinaciones de ambos elementos de simetría originan los **ejes de rotación impropios**:

- **eje de rotorreflexión**, rotación de 360º/n seguida por reflexión en un plano perpendicular al eje.

- **eje de rotoinversión**, rotación de 360º/n seguida por inversión a través de un punto en el eje.

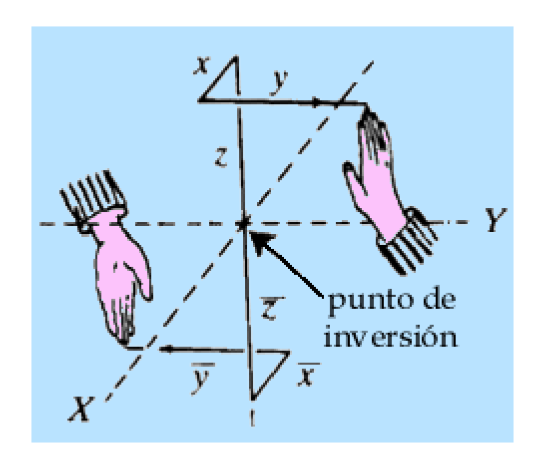
orden 1 **orden 3** **orden 4** **orden 6**

* ***Nota:*** *Los ejes de rotoinversión se representan por el orden del eje (2, 3, 4 o 6) con el símbolo negativo encima de ellos. En esta Web, ese símbolo se identifica también por el signo negativo bien delante o inferior al número de orden del eje.*



(el esquema superior representa una rotoreflexión de orden 4, y el inferior una rotoinversión del mismo orden)

Por su parte el centro de simetría, i, o centro de inversión, es un elemento de simetría puntual que invierte el objeto a través de una línea recta.



- Combinación de elementos de simetría

La combinación de elementos de simetría no se produce al azar, está regida por una serie de normas y limitaciones que son:

- Los elementos que se combinan guardan unas relaciones angulares características.

- La combinación de algunos elementos de simetría genera directamente la presencia de otros

Eje de orden par + centro de simetría ------- plano de simetría perpendicular al eje

Eje de orden n contenido en un plano de simetría -------- n-1 planos de simetría que intersectan en el eje

Dos ejes que se cortan --------- un tercer eje que pasa por el punto de corte

(entre propios e impropios sólo es posible: un propio y dos impropios)

Eje de orden n + eje binario perpendicular -------- n-1 ejes binarios también normales a él

Eje de inversión de orden n(impar) + eje binario perpendicular -------- n ejes binarios y planos de simetría

Eje de inversión de orden n(par) + eje binario perpendicular -------- n/2 ejes binarios y planos de simetría

-Los ejes de inversión realizan una operación de simetría equivalente a la de dos elementos de simetría (excepto el de orden 4)

$\underline{3}$ = 3 + i

Eje de rotoinversión de orden impar = eje propio del mismo orden + centro de simetría

($\underline{6}$ = 3 + m)

Eje de rotoinversión de orden par = eje propio de mitad de orden + un plano de simetría perpendicular a él

- Las 32 clases de simetría

Es fácil prever que en el medio cristalino los elementos de simetría se combinan entre sí hasta engendrar los modelos cristalinos regulares, que se combinan de treinta y dos maneras distintas y dan lugar a las treinta y dos posibles clases cristalinas o grupos puntuales (la operación de simetría deja un punto particular del diagrama inmóvil) existentes.

Estas treinta y dos clases cristalinas se han obtenido mediante las siguientes combinaciones de elementos de simetría:

Símbolo	Combinación de simetría	Elementos de simetría
1	Clases con un sólo elemento de simetría	Eje monario (giro de 360º)
2		Eje binario (giro de 180º)
3		Eje ternario (giro de 120º)
4		Eje cuaternario (giro de 90º)
6		Eje senario (giro de 60º)
$\underline{1}$		Eje monario de inversión (giro de 360º+inversión) = centro de inversión ($\underline{2}$=i)
$\underline{2}$		Eje binario de inversión (giro de 180º+inversión) = plano de simetría ($\underline{2}$=m)
$\underline{3}$		Eje ternario de inversión (giro de 120º+inversión)
$\underline{4}$		Eje cuaternario de inversión (giro de 90º+inversión)
$\underline{6}$		Eje senario de inversión (giro de 60º+inversión) = eje ternario + plano de simetría perpendicular ($\underline{6}$=3/m)
222	Clases con combinación de ejes	Tres ejes binarios en planos perpendiculares entre sí
32		Un eje ternario + tres ejes binarios en planos perpendiculares
422		Un eje cuaternario + dos ejes binarios en planos perpendiculares
622		Un eje senario + tres ejes binarios a 120º (plano perpendicular al senario)

23		Cuatro ejes ternarios + Tres ejes binarios
432		Tres ejes cuaternarios + cuatro ejes ternarios + seis ejes binarios
2/m	Clases con un eje de orden par + un centro de simetría (Eje de orden par + centro de simetría=plano de simetría perpendicular al eje)	Eje binario + plano de simetría perpendicular a él
4/m		Eje cuaternario + plano de simetría perpendicular a él
6/m		Eje senario + plano de simetría perpendicular a él
2mm	Clases con un eje + un plano de simetría que contenga al eje	Eje binario + dos planos de simetría que se cortan en él
3m		Eje ternario + tres planos de simetría que se cortan en él
4mm		Eje cuaternario + cuatro planos de simetría que se cortan en él
6mm		Eje senario + seis planos de simetría que se cortan en él
$\underline{4}2m$	Clases con un eje + dos ejes impropios	Eje cuaternario de inversión + dos ejes binarios + dos planos de simetría
$\underline{4}3m$		Tres ejes cuaternarios de inversión + cuatro ejes ternarios + seis planos de simetría
$\underline{6}2m$		Eje senario de inversión (=eje ternario + plano de simetría perpendicular) + tres ejes binarios + tres planos de simetría
2/m2/m2/m (mmm)	Clases con tres ejes + un centro de simetría	Tres ejes binarios + tres planos de simetría perpendiculares
$\underline{3}2/m$ ($\underline{3}m$)		Un eje ternario + tres ejes binarios + tres planos de simetría perpendiculares + un centro de simetría
4/m2/m2/m (4/mmm)		Un eje cuaternario + un plano de simetría perpendicular + cuatro ejes binarios + cuatro planos de simetría perpendiculares + centro de simetría
6/m2/m2/m (6/mmm)		Un eje senario + un plano de simetría perpendicular + seis ejes binarios + seis planos de simetría perpendiculares + un centro de simetría
2/m$\underline{3}$ (m3)		Cuatro ejes ternarios + tres ejes binarios + tres planos de simetría perpendiculares + un centro de simetría
4/m$\underline{3}$2/m (m3m)		Tres ejes cuaternarios + tres planos de simetría perpendiculares + cuatro ejes ternarios + seis ejes binarios + seis planos de simetría perpendiculares + un centro de simetría

La distribución **sistema cristalino-Redes de Bravais-Grupos puntuales**, o clases de simetría, es la siguiente:

Red de Bravais	Sistema	Grupo puntual
Red Triclínica primitiva, P	*Triclínico*	*1 1*
Red monoclínica primitiva, P	*Monoclínico*	*2 m 2/m*
Red monoclínica centrada en las caras, C		
Red rómbica primitiva, P	*Rómbico*	*222 mm2 mmm*
Red rómbica centrada en las bases, C		
Red rómbica centrada en el interior, I		
Red rómbica centrada en las caras, F		
Red tetragonal primitiva, P	*Tetragonal*	*4 4 4/m 4mm 422 42m 4/mmm*
Red tetragonal centrada en el interior, C		
Red hexagonal primitiva, P	*Hexagonal*	*6 6 6/m 6mm 622 62m 6/mmm*
Red romboédrica primitiva, P	*Romboédrico o Trigonal*	*3 3 3m 32 3m*
Red cúbica primitiva, P	*Cúbico o Isométrico*	*23 m3 43m 432 m3m*
Red cúbica centrada en el interior, I		
Red cúbica centrada en las caras, F		

- Simetría y redes de Bravais

La presencia de elementos de simetría en la red cristalina condiciona, a su vez, la existencia de ciertas relaciones métricas entre los elementos de la celda elemental, las relaciones angulares entre los ejes del cristal, o ejes cristalográficos, y las intersecciones sobre estos ejes de la cara fundamental (111). Las dimensiones de estas intersecciones son proporcionales a las traslaciones en las tres dimensiones de la red.

Por esta razón se han agrupado las redes de Bravais en siete grandes grupos: redes triclínicas, redes monoclínicas, redes rómbicas, redes tetragonales, redes hexagonales, redes romboédricas y redes cúbicas. Cada uno de estos grupos de redes corresponde a un sistema cuyo nombre es idéntico al de las redes correspondientes y posee unas constantes reticulares fijas y una mínima simetría característica.

Red de Bravais	Sistema
Red Triclínica primitiva, P	*Triclínico*
Red monoclínica primitiva, P	*Monoclínico*
Red monoclínica centrada en las caras, C	
Red rómbica primitiva, P	*Rómbico*
Red rómbica centrada en las bases, C	
Red rómbica centrada en el interior, I	
Red rómbica centrada en las caras, F	
Red tetragonal primitiva, P	*Tetragonal*
Red tetragonal centrada en el interior, C	
Red hexagonal primitiva, P	*Hexagonal*
Red romboédrica primitiva, P	*Romboédrico o Trigonal*
Red cúbica primitiva, P	*Cúbico o Isométrico*
Red cúbica centrada en el interior, I	
Red cúbica centrada en las caras, F	

Las constantes reticulares y la mínima simetría que caracteriza a cada grupo de redes o sistema cristalino es la siguiente:

- **Sistema triclínico** (a#b#c α #ß#γ #90º)

No posee ninguna simetría mínima.

- **Sistema monoclínico** (a#b#c α =γ =90º#ß>90º)

Presenta como simetría mínima un eje de rotación binario o un eje de inversión binario (=plano de simetría)

- **Sistema rómbico** (a#b#c α =ß=γ =90º)

Como mínimo posee tres ejes binarios perpendiculares entre sí.

- **Sistema tetragonal** (a=b#c α =ß=γ =90º)

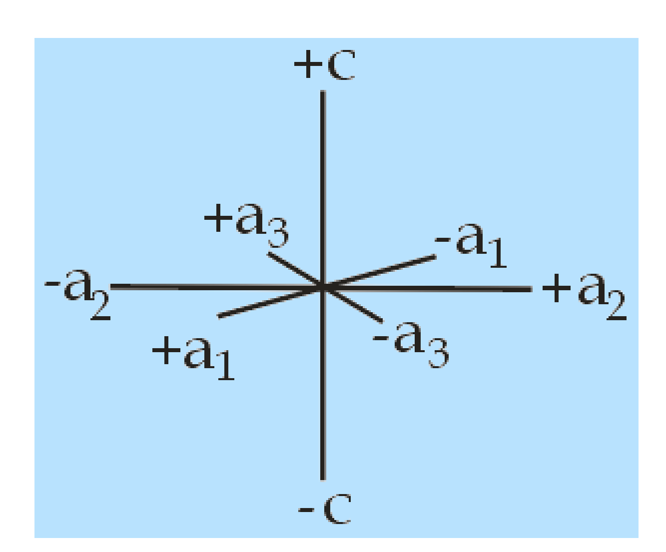
Posee como característica fundamental un eje de rotación cuaternario o un eje de inversión cuaternario

- **Sistema hexagonal** (a=b#c α =ß=90º, γ =120º)

Su característica fundamental es la presencia de un eje de rotación senario o un eje de inversión senario (eje ternario + plano de simetría perpendicular)

Para mayor precisión, generalmente se introduce un cuarto eje **i**, coplanario con **a** y **b**, que forma un ángulo de 120° con cada uno de ellos, así la cruz axial será (a=b=i#c α =ß=90°, γ =120°)

*Índices de Miller hexagonales: Como se trabaja con un cuarto índice, que se sitúa en el plano a1 a2 y a 120º de cada uno de estos ejes, los planos hexagonales se van a representar por cuatro índices (hkil). El valor de i se determina como h+k.



- **Sistema romboédrico o trigonal** (a=b=c α =ß=γ #90º)

Su característica común es la presencia de un eje de rotación ternario o un eje de inversión ternario (eje ternario + centro de simetría)

- Sistema cúbico (a=b=c $\alpha = \beta = \gamma = 90º$)

Posee como característica fundamental cuatro ejes de rotación ternarios inclinados a 109,47º

NOTA: Además de las constantes reticulares, para definir un sistema cristalino puede utilizarse la ***relación paramétrica***, siendo ésta la relación existente entre los módulos de ***a*** y ***c*** respecto al módulo de ***b***:

a/b : 1 : c/b

Normalmente se toman estos valores y los ángulos para definir la red.

1.4- SIMETRÍA CON TRASLACIÓN

- Elementos de simetría con traslación

La red cristalina sólo tiene sentido como indicadora de la periodicidad que se presenta en el cristal, como consecuencia de la repetición del motivo. Debido a ello, la simetría que revela por sí la red no tiene que ser necesariamente la que posea el cristal aunque en general lo sea.

Ejemplo: La coesita (variedad de la sílice de alta presión) tiene una red cuya métrica es rómbica, mientras que la estructura es monoclínica, ya que el motivo carece de ciertos elementos de simetría que la métrica de la red indicaban.

Es fácil comprender que debido a que la red es solamente la consecuencia de unas fuerzas cohesivas entre los átomos que forman el cristal, fuerzas que obligan a una repetición monótona de las agrupaciones atómicas, la simetría de la red debe estar íntimamente relacionada con la del cristal, entendido como agrupación repetitiva de átomos.

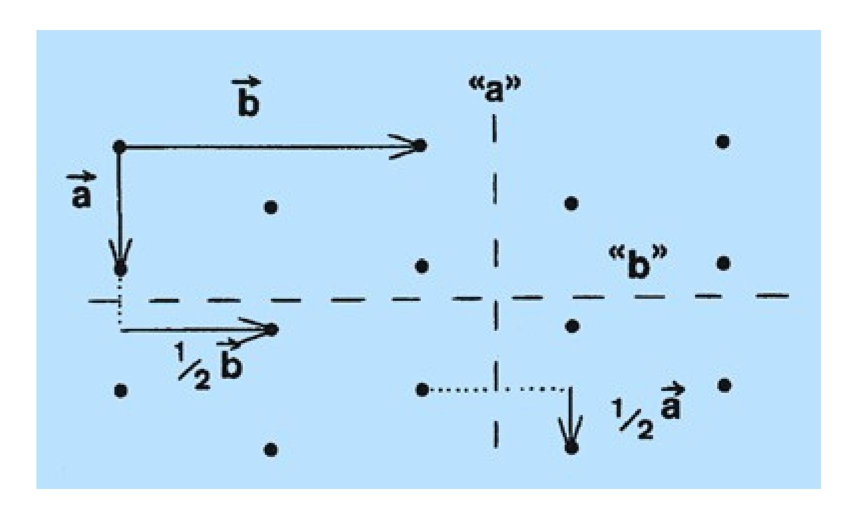
La red nos proporciona, por tanto, la simetría máxima que el cristal puede tener, pero dicha simetría depende de la simetría propia del **motivo**. La complejidad que el **motivo cristalino, átomos, iones y moléculas**, aporta a la red cristalina hace que los elementos de simetría del medio cristalino se amplíen. Aparece la traslación, que tiene dimensiones submicroscópicas no accesibles a la morfología macroscópica.

Los operadores de simetría que completan la tarea de rellenar el espacio cristalino se consideran, cada uno de ellos, como una sola y nueva operación de simetría. Estos son los **planos de deslizamiento,** que implican la reflexión asociada a una traslación y los **ejes helicoidales** que implican, a su vez, giro y traslación.

- Plano de deslizamiento

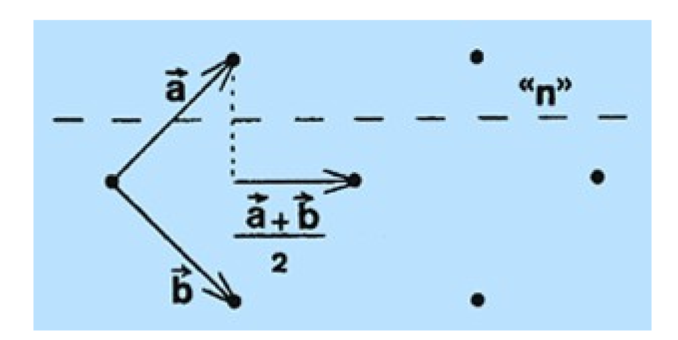
El plano de deslizamiento realiza simultáneamente dos operaciones: refleja la imagen o traslada la imagen a intervalos de media traslación.

- Cuando la semitraslación asociada al plano de deslizamiento corresponde a alguna de las direcciones fundamentales del cristal, el plano se denomina a, b, c, respectivamente.



- Cuando la semitraslación corresponde a la diagonal del plano reflector, es decir, el plano de deslizamiento se sitúa paralelo a la diagonal entre las filas definidas por a, b y c, el plano se simboliza por **n** y las componentes de su traslación son:

a/2 + b/2, ***b/2 + c/2 , c/2 + a/2 y a/2 + b/2 + c/2***



- Los planos **d** (aparece en la estructura del diamante) se tratan también de planos diagonales. Presentan como componentes de traslación cuartos de la fundamental, es decir:

a/4 ± b/4, ***b/4 ± c/4 , c/4 ± a/4 y a/4 ± b/4 ± c/4***

El siguiente cuadro sintetiza la notación y simetría de los planos en los grupos espaciales:

Símbolo	Símbolo gráfico	Orientación y Traslación
m	perpendicular al papel paralelo al papel	(100) o (010), ninguna traslación (001), ninguna traslación
a	------- perpendicular al papel paralelo al papel	(010), traslación a/2 (001), traslación a/2
b	------- perpendicular al papel paralelo al papel	(100), traslación b/2 (001), traslación b/2
c	.... perpendicular al papel	(100) 0 (010), traslación c/2
n	._._._._._._ perpendicular al papel paralelo al papel	traslación (b+c)/2 en (100); traslación (c+a)/2 en (010) traslación (a+b)/2 en (001); traslación (a+b+c)/2 en (1$\underline{1}$0) en sistemas tetragonal o cúbico
d	perpendicular al papel $\frac{3}{8}$ $\frac{1}{8}$ paralelo al papel	traslación (b+c)/4 en (100); traslación (c+a)/4 en (010) traslación (a+b)/4 en (001); traslación (a+b+c)/4 en (1$\underline{1}$0) en sistemas tetragonal o cúbico

- Eje helicoidal

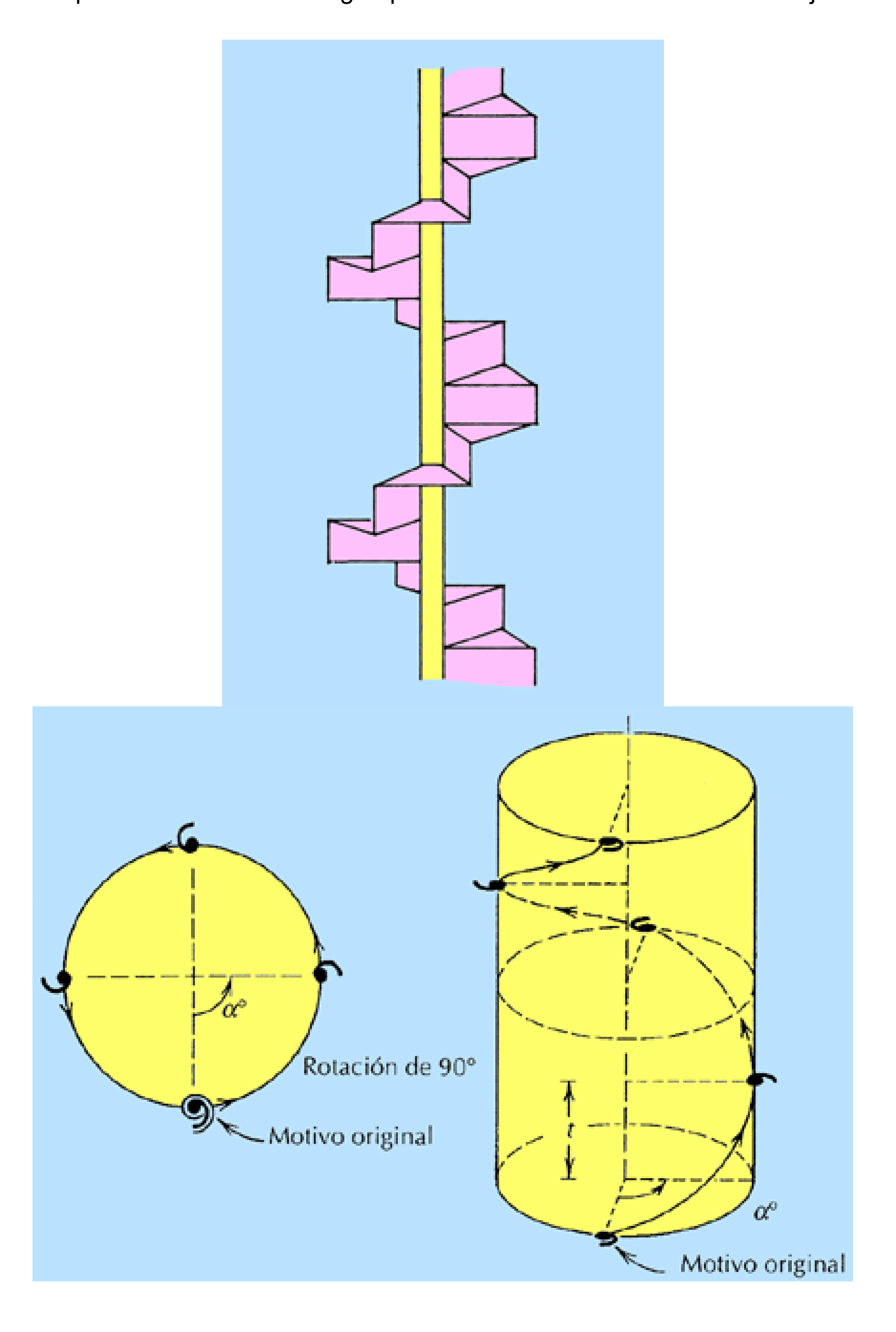
Un eje helicoidal implica, similarmente, una operación doble:

Un giro, el permisible para su orden

Una traslación constante a lo largo del eje

Como sabemos, el **orden del eje** es el número de repeticiones que se necesitan para lograr la identidad, implicando una serie de giros sucesivos hasta haber completado su operación de simetría total.

En un eje helicoidal, cada uno de estos giros parciales debe asociarse a una parte alícuota de la traslación total, **t**, paralela a la dirección del eje. La identidad se logra en la operación giro cuando se ha aplicado tantas veces el giro permisible como indica el orden del eje.



Haciendo el periodo de identidad, t, coincidente con el giro completo del eje, se obtienen los siguientes ejes helicoidales:

Símbolo	Símbolo gráfico	Denominación	Giro	Traslación
2_1		Eje binario helicoidal	180º	t/2
3_1		Eje ternario helicoidal derecho	120º dextrógiro	t/3
3_2		Eje ternario helicoidal izquierdo	120º levógiro	t/3
4_1		Eje cuaternario helicoidal derecho	90º dextrógiro	t/4
4_3		Eje cuaternario helicoidal izquierdo	90º levógiro	t/4
6_1		Eje senario helicoidal derecho	60ºdextrógiro	t/6
6_5		Eje senario helicoidal izquierdo	60º levógiro	t/6

También se pueden deducir los ejes helicoidales haciendo que la identidad se alcance para N/n giros, siendo N el orden del eje y n un divisor entero de N.

N (orden del eje)	n (divisor entero de N)	N/n (giros)	Símbolo	Símbolo gráfico	Denominación	Giro	Traslación
4	2	2	4_2		Eje cuaternario-binario helicoidal	90º	t/2
6	3	2	6_3		Eje senario-ternario helicoidal	60º	t/2
6	2	3	6_2		Eje senario-binario helicoidal derecho	60º dextrógiro	t/3
6	2	3	6_4		Eje senario-binario helicoidal izquierdo	60º levógiro	t/3

- Los 17 grupos planos

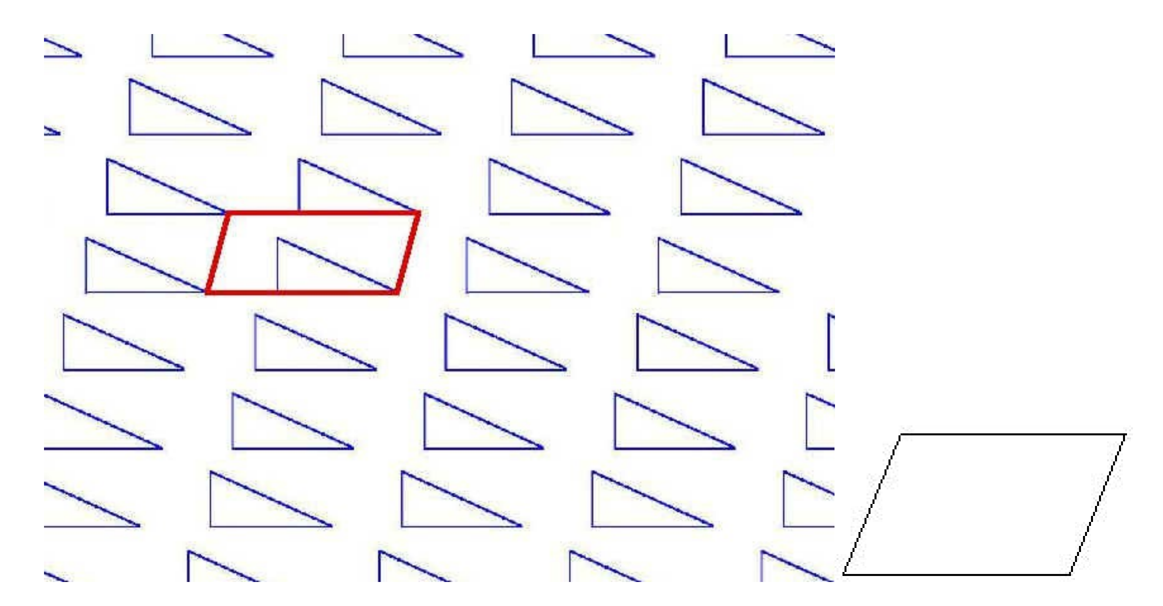
En la deducción de los grupos planos hay que tener en cuenta que es el motivo, contenido de la celda definida por unas traslaciones dadas, el que muestra la existencia de los elementos de simetría. Es decir, que las partes del motivo están relacionadas entre sí por dichos elementos de simetría (que puede ser simetría con traslación); que la suma de estas partes constituye la celda; y que las celdas implican una métrica dada, es decir, tiene una forma y unas dimensiones que condicionan una simetría máxima.

En los grupos planos los haces de elementos de simetría son perpendiculares al plano que se asocia a un tipo de red plana. El número de estos grupos planos es de 17.

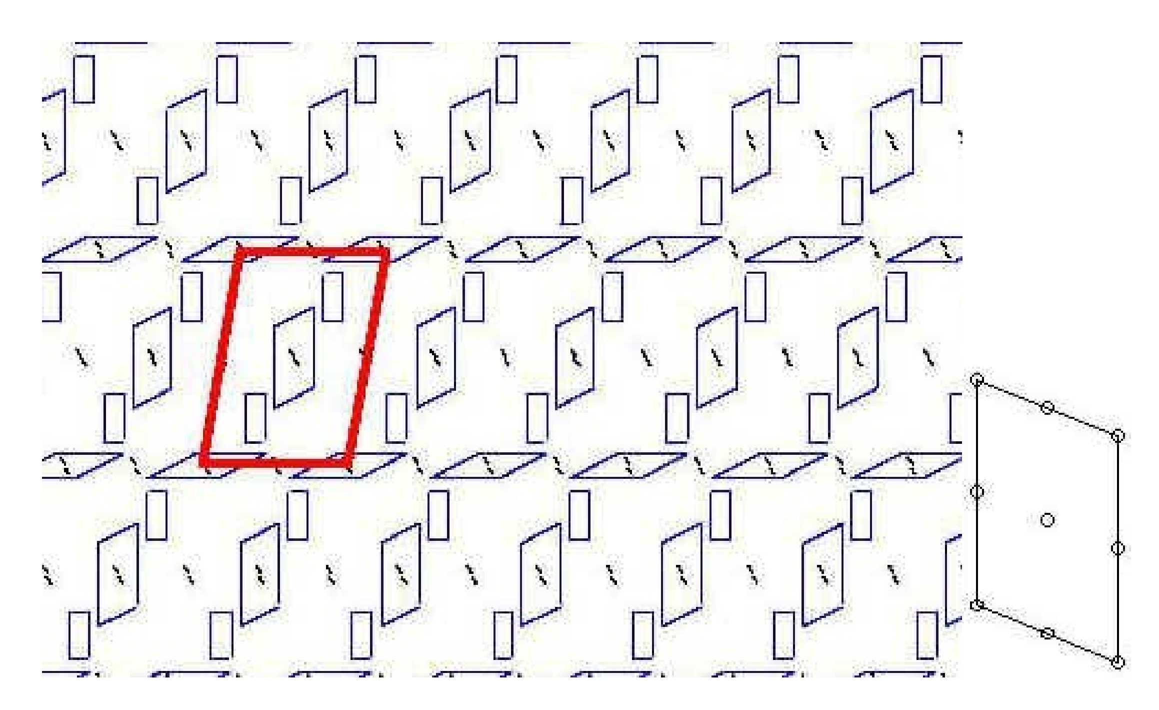
- Grupos planos con red oblicua

La simetría máxima que permite una red obícua es un haz de ejes binarios. Existirán, por tanto, dos posibilidades:

- **Grupo plano p1:** p como indicativo de primitivo y 1 como indicativo de no simetría. El dominio complejo coincide con el motivo y, por tanto, su multiplicidad es 1.



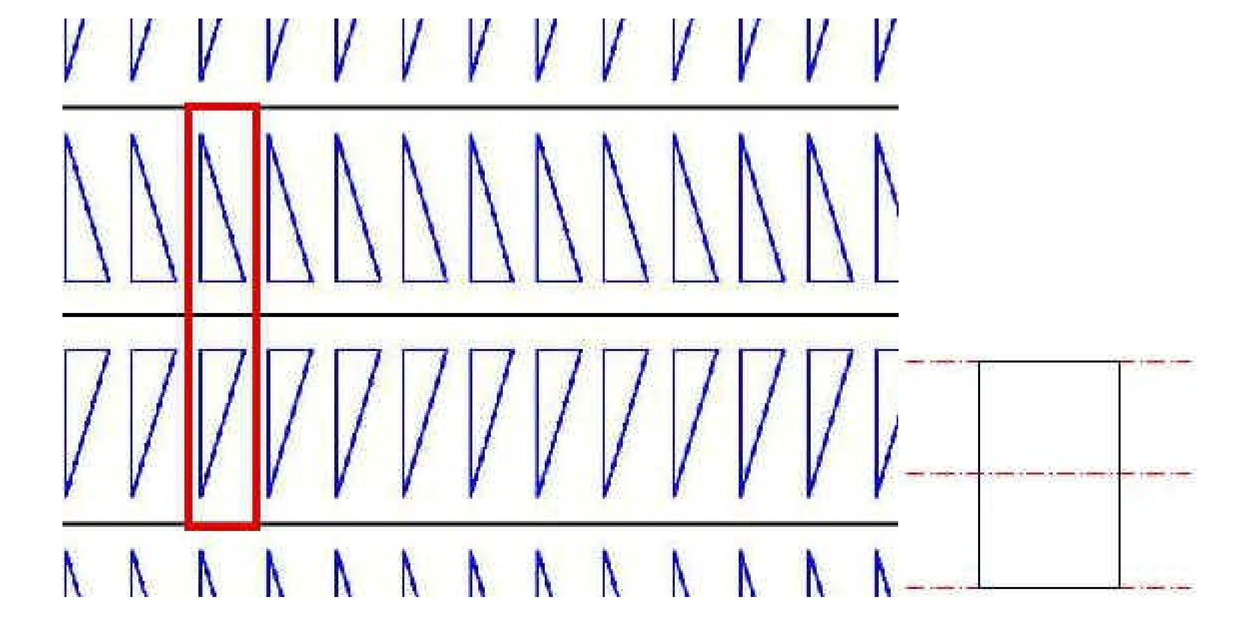
Grupo plano p2: p como indicativo de primitivo y 2 como indicativo de eje binario de simetría. La multiplicidad del dominio complejo es 2 ya que la simetría genera duplicidad del motivo.



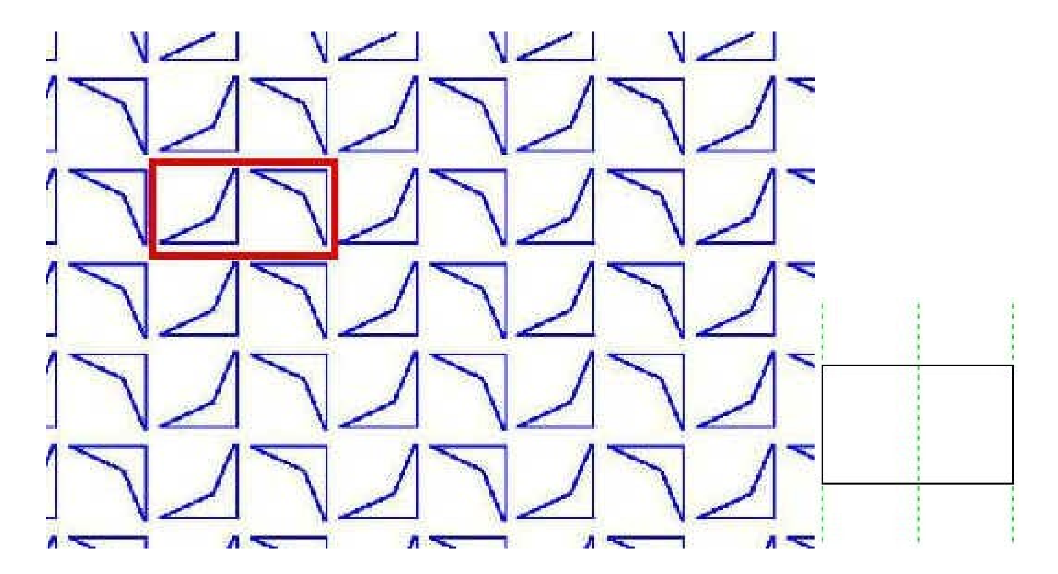
- Grupos planos con red rectangular

La simetría máxima que permite una red rectangular es dos haces de planos de simetría y un haz de ejes binarios. Existirán, por tanto, diferentes combinaciones:

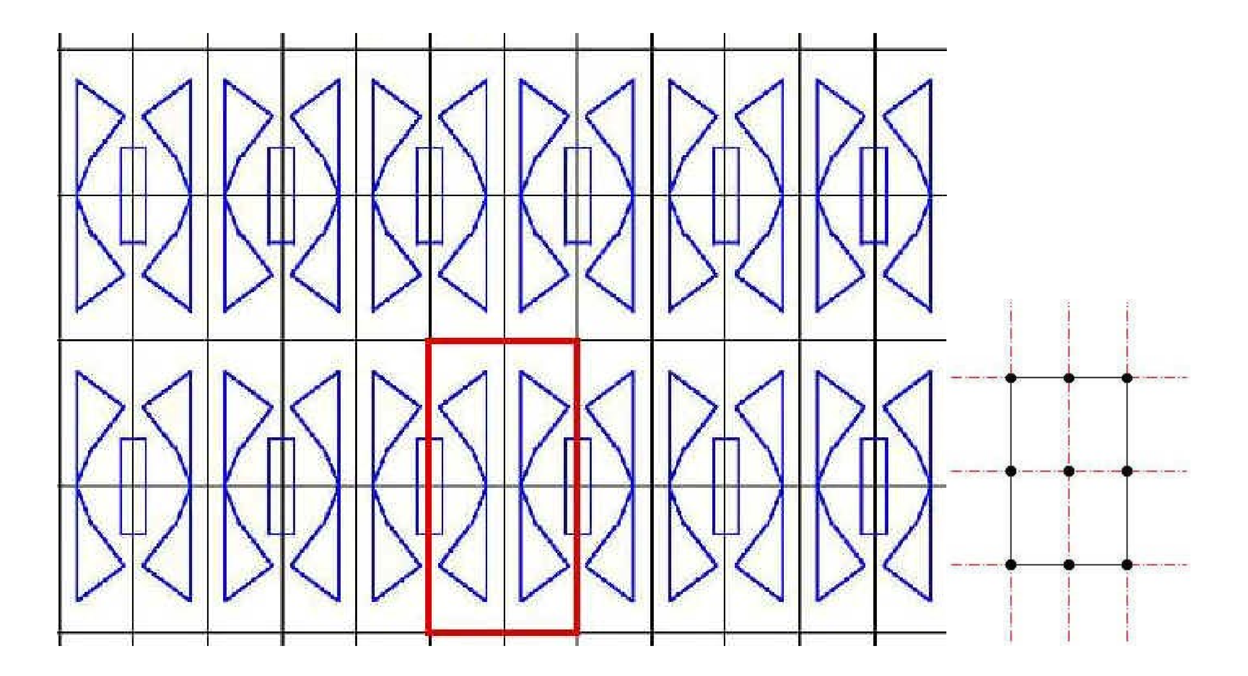
Grupo plano pm: p como indicativo de primitivo y **m** como indicativo del plano de simetría. La multiplicidad del dominio complejo es 2 ya que la simetría genera duplicidad del motivo.



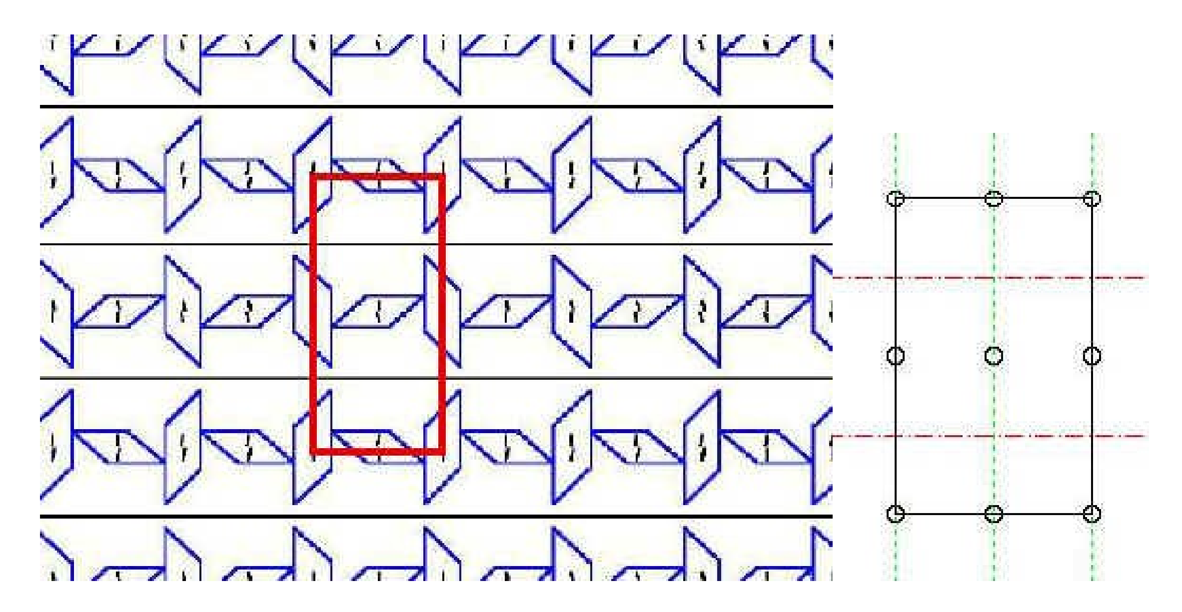
- **Grupo plano pg: p** como indicativo de primitivo y **g** como indicativo del plano de deslizamiento. La multiplicidad del dominio complejo es 2 ya que la simetría genera duplicidad del motivo.



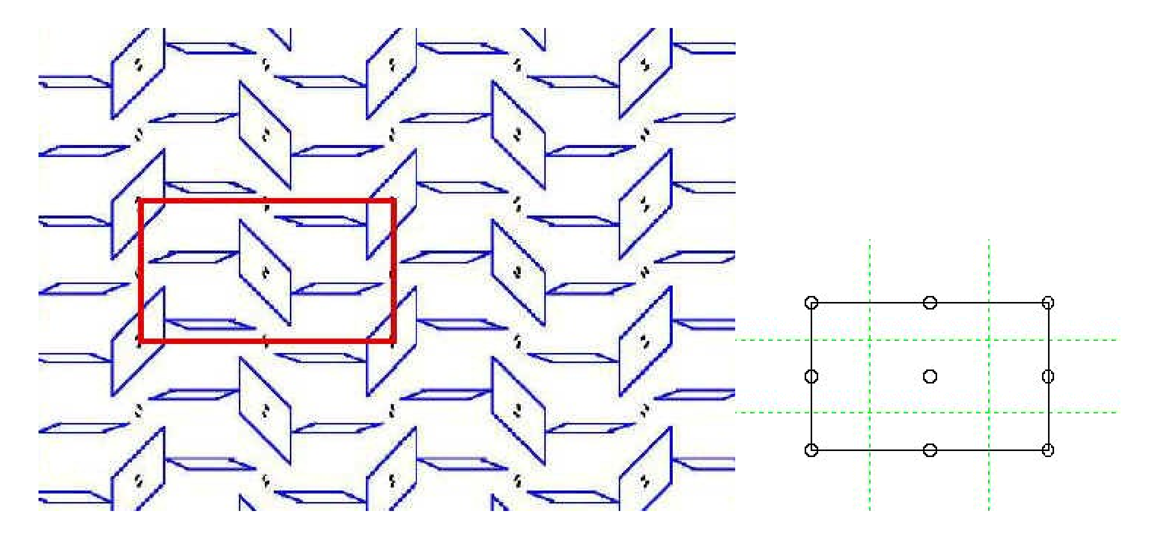
- Grupo plano pmm (p2mm): p como indicativo de primitivo y dos m como indicativo de planos de simetría mutuamente perpendiculares. Los planos de simetría llevan implícitos la aparcición de ejes binarios. La multiplicidad del dominio complejo es 4.



- **Grupo plano pmg (p2mg): p** como indicativo de primitivo y planos perpendiculares de tipo distinto (**m** ordinarios y **g** de deslizamiento). Esto hace que los ejes de simetría no se encuentren en la intersección sino desplazados, a lo largo del plano de deslizamiento, a mitad de la componente desplazamiento. El origen de la celda se toma sobre un eje binario. La multiplicidad del dominio complejo es 4.

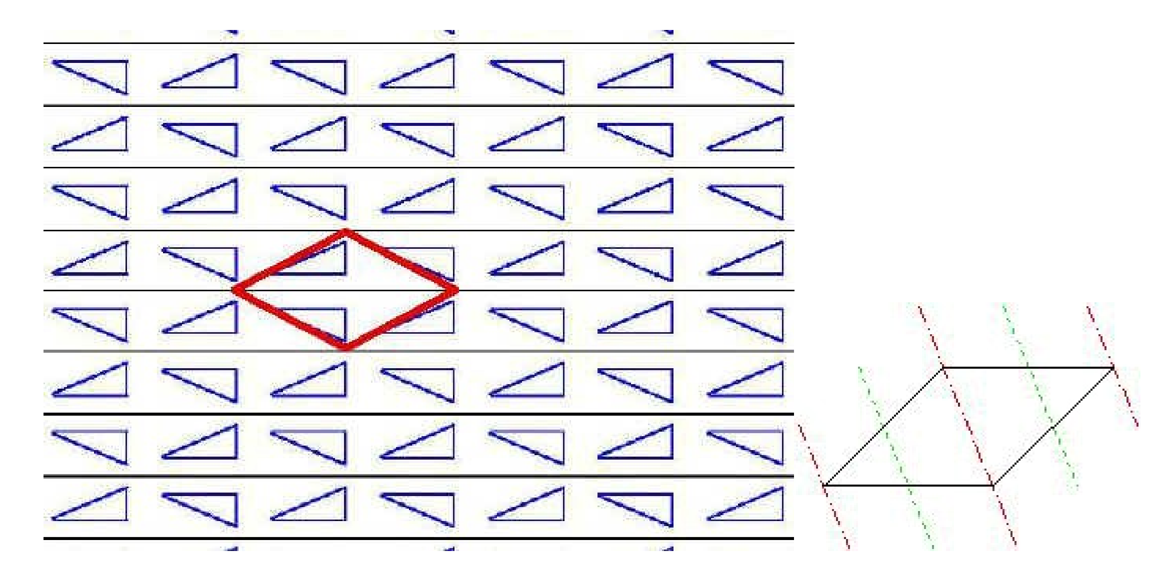


- **Grupo plano pgg(p2gg): p** como indicativo de primitivo y dos **g** de planos perpendiculares de deslizamiento. Esto hace que los ejes de simetría no se encuentren en la intersección sino desplazados, a lo largo de cada plano de deslizamiento, a mitad de la componente deslizamiento. El origen de la celda se toma sobre un eje binario. La multiplicidad del dominio complejo es 4.

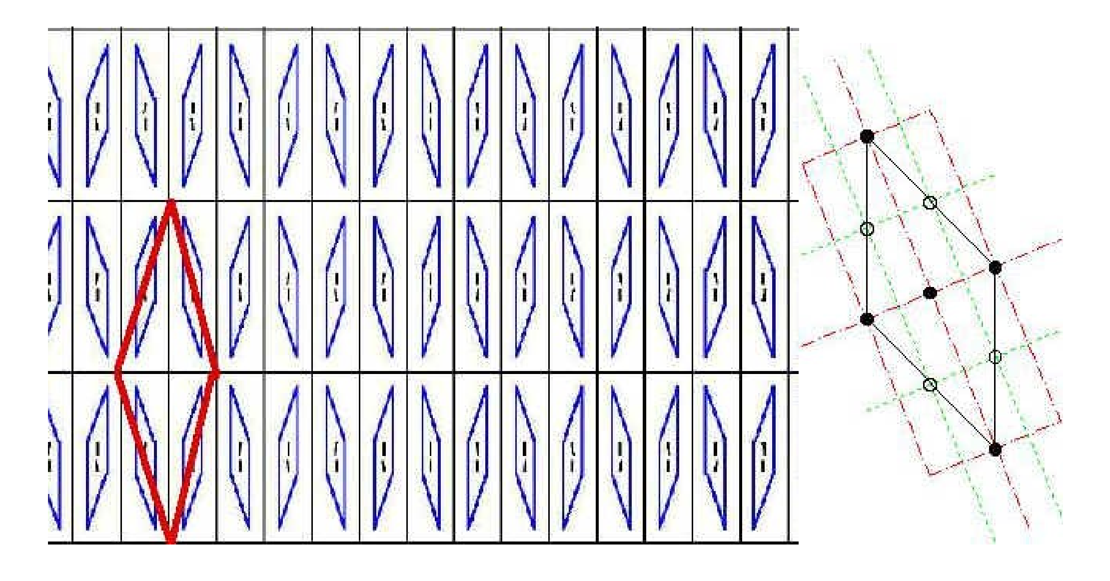


- Grupos planos con red rómbica o rectangular centrada

Grupo plano cm: c como indicativo de la operación de centrado y **m** como indicativo del plano de simetría. La operación de centrado lleva implícita la existencia de un plano de deslizamiento. La multiplicidad del dominio complejo es 4.



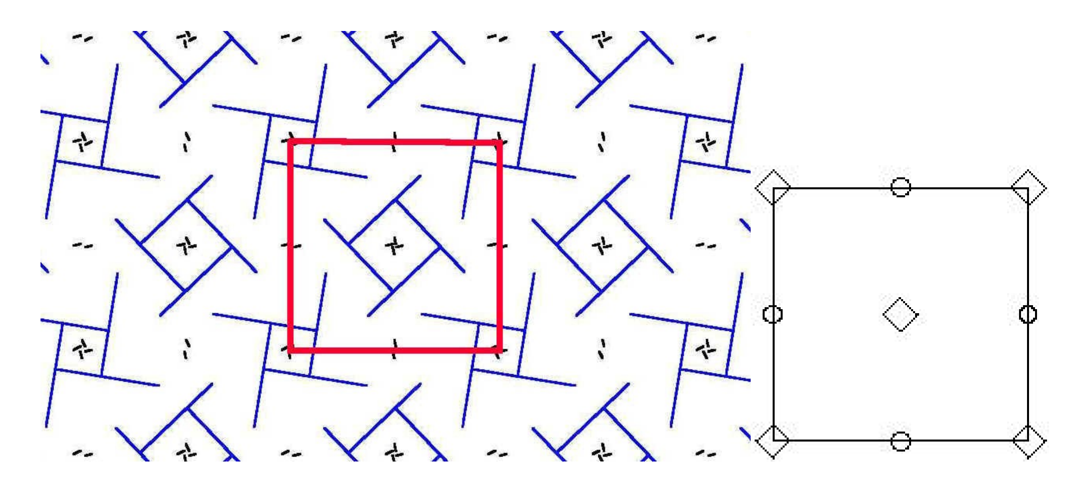
Grupo plano cmm (c2mm): c como indicativo de centrado y dos **m** como indicativo de planos de simetría mutuamente perpendiculares. La operación de centrado lleva implícita la existencia de planos de deslizamiento. La multiplicidad del dominio complejo es 4. Los planos de simetría, ordinarios y de deslizamiento, llevan implícitos la aparcición de ejes binarios en las intersecciones del mismo tipo de planos, no de distintos. La multiplicidad del dominio complejo es 8.



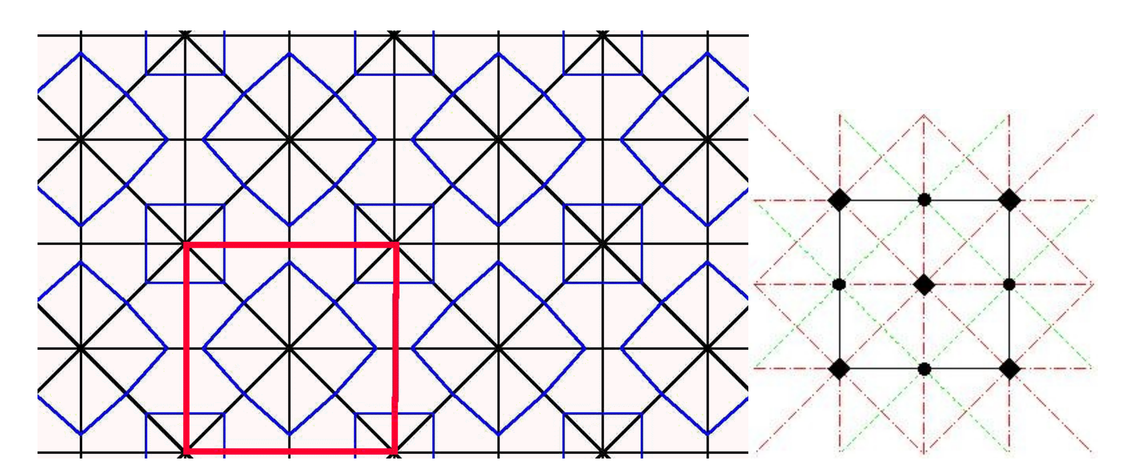
- Grupos planos con red cuadrada

La simetría máxima que permite una red cuadrada es un haz de ejes cuaternarios y sus planos de simetría contenidos en ellos. En todos los casos se toma un eje cuaternario como origen de la celda apareciendo otro eje cuaternario en el centro de la celda. Existirán, por tanto, diferentes combinaciones:

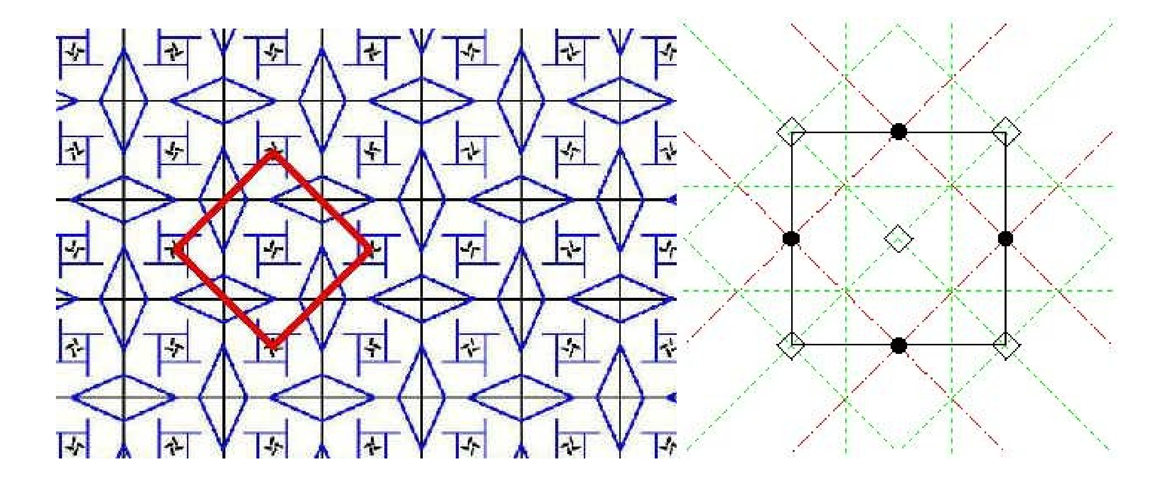
- **Grupo plano p4: p** como indicativo de primitivo y **4** como indicativo de eje cuaternario de simetría. Los ejes cuaternarios generan la aparcición de ejes binarios intercalados entre los cuaternarios. La multiplicidad del dominio complejo es 4.



- **Grupo plano p4mm: p** como indicativo de primitivo, **4** como indicativo de eje cuaternario de simetría y **m** como los planos de simetría que contienen a dichos ejes. Los ejes cuaternarios generan la aparción de ejes binarios intercalados entre los cuaternarios, y toda la simetría genera planos de deslizamiento paralelos a las diagonales de la celda. La multiplicidad del dominio complejo es 8.



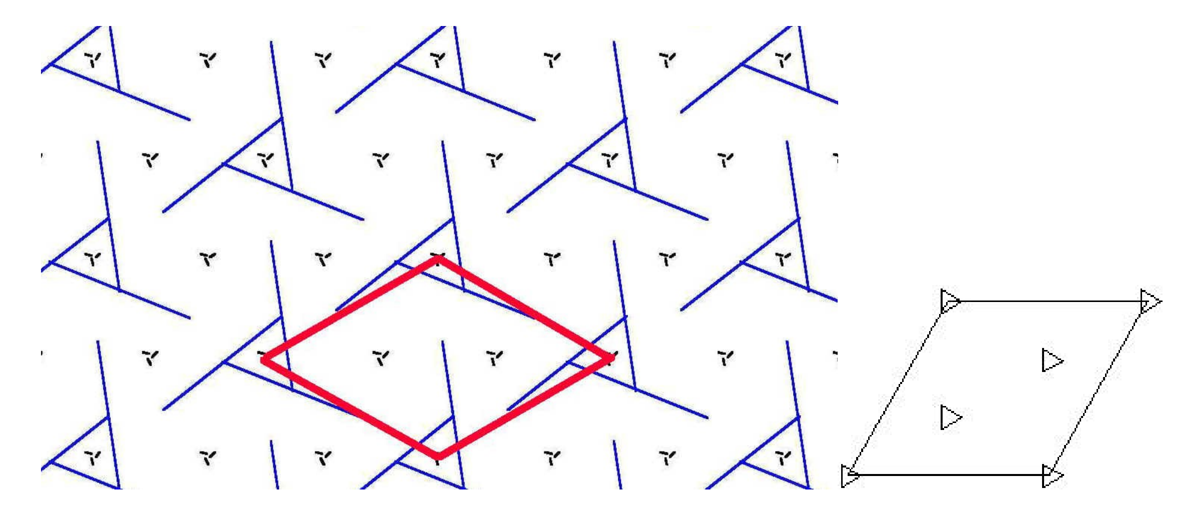
Grupo plano p4gm: p como indicativo de primitivo, **4** como indicativo de eje cuaternario de simetría, **g** como planos de deslizamiento y **m** como los planos de simetría. La multiplicidad del dominio complejo es 8.



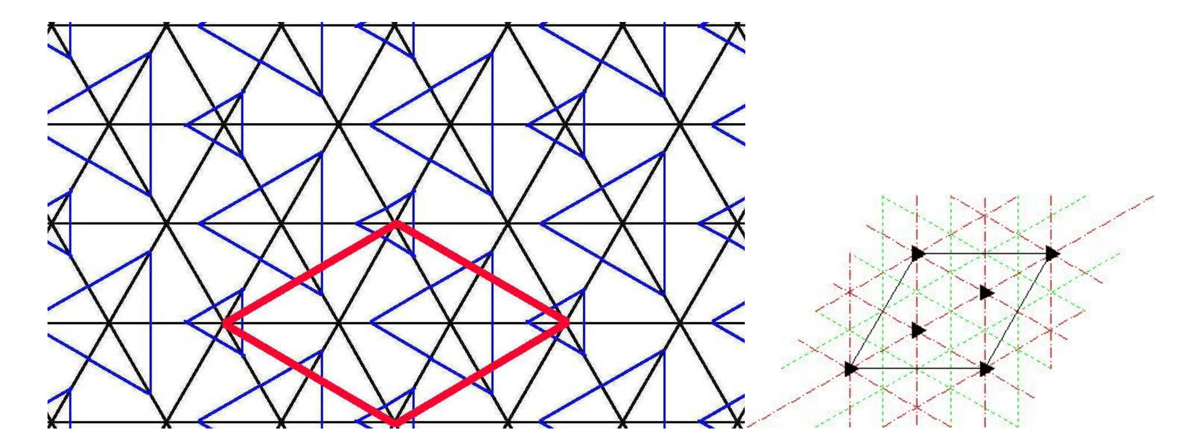
- Grupos planos con red hexagonal

La simetría máxima que permite una red hexagonal es un haz de ejes senarios, o ternarios, y los planos de simetría que contienen a dichos ejes. Existirán, por tanto, diferentes combinaciones:

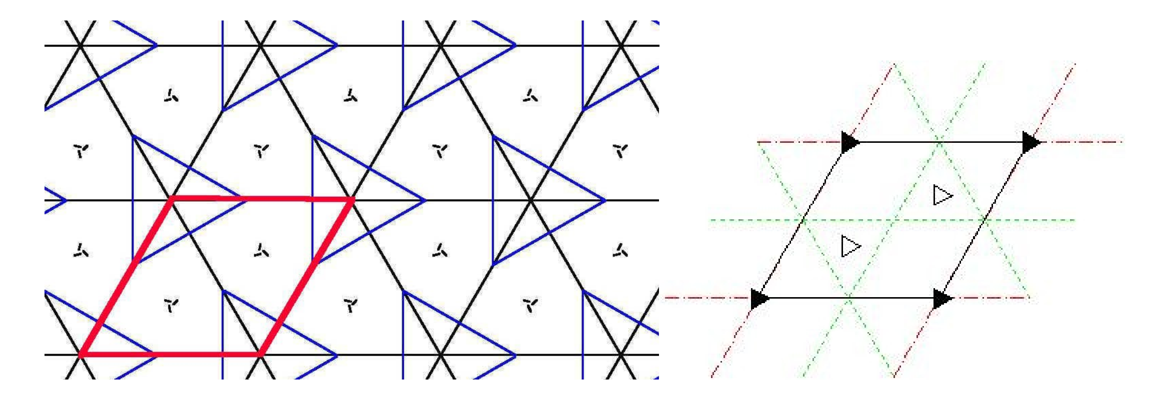
Grupo plano p3: p como indicativo de primitivo y **3** como indicativo de eje ternario de simetría. Los ejes ternarios generan la aparción de otros ternarios en el centro de los dos triángulos equiláteros que conforman la celda. La multiplicidad del dominio complejo es 3.



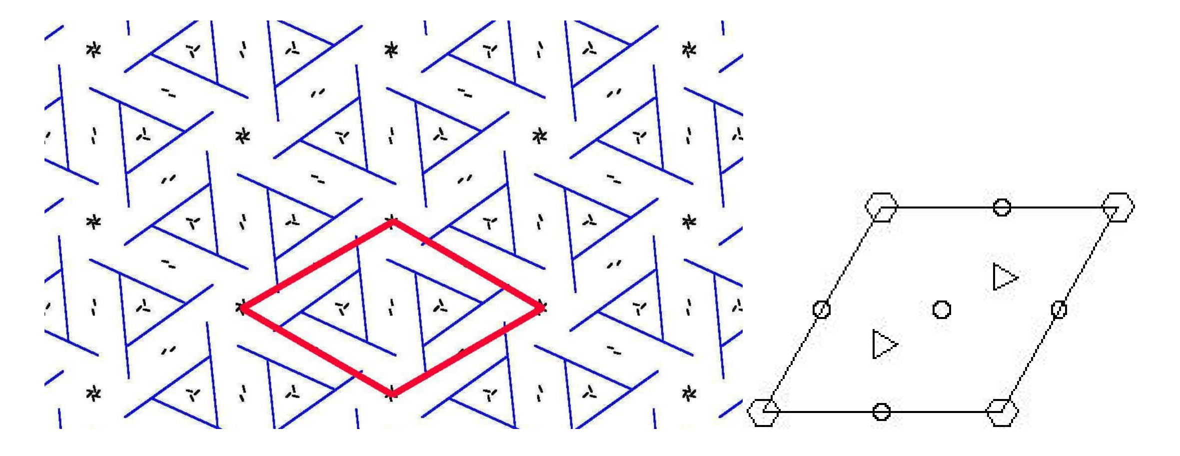
- **Grupo plano p3m1: p** como indicativo de primitivo, **3** como indicativo de eje ternario de simetría y **m** como plano de simetría en la diagonal mayor del rombo. Se genera alternancia de planos de deslizamiento. La multiplicidad del dominio complejo es 6.



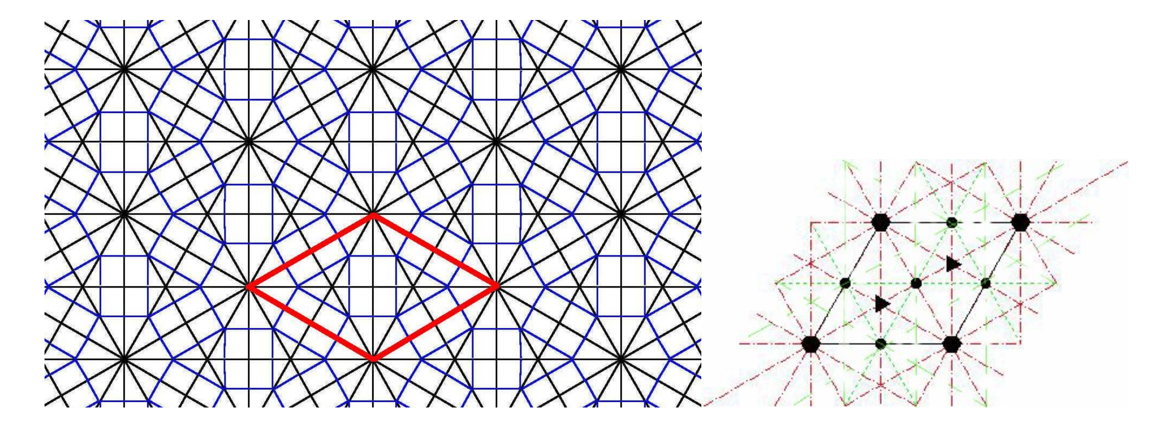
- **Grupo plano p31m: p** como indicativo de primitivo, **3** como indicativo de eje ternario de simetría y **m** como plano de simetría en la diagonal menor del rombo. Se genera alternancia de planos de deslizamiento. La multiplicidad del dominio complejo es 6.



- **Grupo plano p6: p** como indicativo de primitivo y **6** como indicativo de eje senario de simetría. Se generan ejes ternarios en los centros de los triángulos equiláteros conformadores y ejes binarios en los centros de los lados de dichos triángulos. La multiplicidad del dominio complejo es de 6.



- **Grupo plano p6mm: p** como indicativo de primitivo, **6** como indicativo de eje senario de simetría y **m** de los planos de simetría que los contienen. Se generan ejes ternarios en los centros de los triángulos equiláteros conformadores, ejes binarios en los centros de los lados de dichos triángulos y planos de deslizamiento alternantes. La multiplicidad del dominio complejo es de 12.



La tabla que relaciona los grupos puntuales y los grupos planos pone de manifiesto que no todas las combinaciones conducen a nuevos o diferentes grupos puntuales. La interacción de la simetría del motivo con la simetría de las diversas redes planas afecta al contenido de simetría resultante del modelo planar. El modelo final muestra la simetría de la red cuando los elementos de simetría del motivo están alineados con los elementos de simetría correspondiente de la red. Si el motivo tiene menos simetría que la red, el modelo expresará el menor grado de simetría del motivo con los elementos de simetría de éste alineados con los correspondientes elementos de simetría de la red.

Red	Grupo puntual	Grupo plano
Oblícua	**1**	**p1**
	2	**p2**
Rectangular	**m**	**pm pg**
	mm	**pmm pmg pgg**
Rómbica	**m**	**cm**
	mm	**cmm**
Cuadrada	**4**	**p4**
	4mm	**p4mm p4gm**
Hexagonal	**3**	**p3**
	3m	**p3m p31m**
	6	**p6**
	6mm	**p6mm**

- Grupos espaciales

Los grupos espaciales representan las diversas formas en que los motivos pueden distribuirse en el espacio en una estructura homogénea.

Los grupos espaciales surgen de la combinación de los 14 tipos posibles de redes espaciales (redes de Bravais) con la simetría propia de las 32 clases cristalinas, o grupos puntuales, más la simetría con traslación.

Las características de la red se expresan con las letras **P, A, B, C, F, I, R,** de las redes de Bravais ,que designan el tipo de red general. A continuación se describen en el símbolo los elementos de simetría.

Ejemplos:

P4/m2/m2/m ó p4mmm

- **4/m2/m2/m ó 4mmm:** Grupo de simetría 4mmm

- **P:** Red tetragonal sencilla

P4$_2$/n2/n2/m ó P4$_2$/nnm

- **4$_2$/nnm:** Grupo isogonal con el 4mmm, donde los ejes de rotación cuaternaria del grupo puntual aparecen como ejes de rotoinversión cuaternaria y helicoidal cuaternario, paralelos y alternativos. Existen planos de deslizamiento n y de simetría, m, así como ejes de rotación binaria con helicoidales binarios intercalados.

- **P:** Red tetragonal sencilla

Al igual que ocurría en los grupos planos, en los grupos espaciales con redes no primitivas, la operación de centrado introduce la simetría con traslación, y, sin embargo, estos nuevos elementos no se aprecian en los símbolos. Por ejemplo:

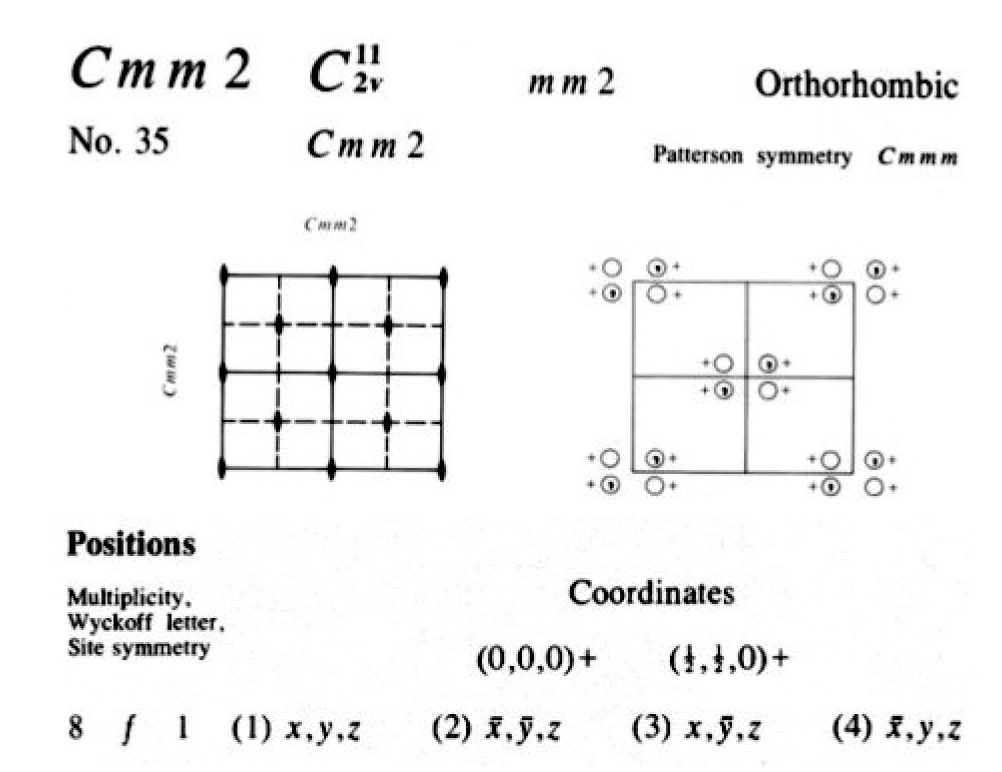
C2/m

- **2/m**: Grupo de simetría 2/m. Sin embargo aparecen, debido al centrado, ejes helicoidales binarios intercalados con los binarios, y planos de deslizamiento intercalados con los planos de simetría.

- **C**: Red rómbica centrada de tipo C

Los 230 grupos espaciales vienen descritos en las International Tables for X-ray Crystallography, clasificadas según los grupos puntuales y los sistemas cristalinos.

Una composición de la información contenida en estas Tablas se muestra a continuación para el grupo espacial Cmm2 en el que la C significa una red centrada en las caras, separadas por el eje c, la primera m representa un plano de simetría perpendicular al eje a, la segunda m representa un plano de simetría perpendicular al eje b, y el 2 se refiere al eje binario paralelo al eje c.



EL ESTADO CRISTALINO

2. INTRODUCCIÓN A LA CRISTALOGRAFÍA MORFOLÓGICA

Los primeros estudios de la Cristalografía trataban, obviamente, sobre el aspecto externo de los cristales. La naturaleza del estado cristalino u orden interno de una sustancia no es un hecho tan evidente como la visión de las perfectas caras o formas cristalinas de un mineral. La primera conexión entre forma externa o caras de un cristal (hábito) y su orden interno no se realizó hasta el siglo XVII. Más adelante se vio que el orden interno podría existir aunque no hubiera evidencia externa de ello, y sólo en tiempos relativamente recientes, y como resultado de técnicas de rayos X y de difracción de electrones, se incluyen como cristalinos materiales biológicos.

La simetría a la que pertenecen los cristales puede ser identificada mediante la observación de su morfología externa. A veces, esto es un procedimiento muy simple ya que, por ejemplo, cristales que crecen con forma de cubos pertenecen obviamente al sistema cúbico: la simetría externa del cristal y el orden interno subyacente (celda unidad) son idénticos. Sin embargo, puede ser que un cristal perteneciente al sistema cúbico no crezca bajo la forma externa de un cubo; la celda unidad puede apilarse para formar un octaedro, un tetraedro, etc. La experiencia ha demostrado que sólo muy ocasionalmente los cristales crecen con la misma forma que su celda unidad, las diferentes formas o hábitos que adoptan los cristales dependerán de determinados factores químicos y físicos.

Pero, ¿cómo reconocer a qué sistema cristalino pertenece un cristal aunque su hábito sea diferente, y a veces incluso llegue a encubrir, la forma de la celda unidad?

Si el cristal, bajo circunstancias favorables de crecimiento, ha desarrollado superficies externas planas y uniformes, "**caras**", de acuerdo a su orden interno, la solución está en situarlo en una de las clases cristalinas definidas. Los cristales de la misma clase cristalina no tienen la misma forma cristalina pero sí tienen una determinada simetría en común. Para conocer estas clases cristalinas es necesario comprender la simetría que afecta al orden interno de los cristales, y por ende, a la simetría de los cristales.